МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РФ

ВЕСТНИК
ТОМСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

МАТЕМАТИКА И МЕХАНИКА

TOMSK STATE UNIVERSITY
JOURNAL OF MATHEMATICS AND MECHANICS

Научный журнал

2017 **№ 48**

Свидетельство о регистрации
ПИ № ФС77-30658 от 20 декабря 2007 г.
выдано Федеральной службой по надзору
в сфере массовых коммуникаций, связи
и охраны культурного наследия

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ТОМСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Учредитель:
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Национальный исследовательский Томский государственный университет»

Журнал «Вестник Томского государственного университета. Математика и механика» входит в Перечень ВАК изданий для публикации основных результатов кандидатских и докторских диссертаций. Журнал выходит 6 раз в год и распространяется по подписке, подписной индекс 44064 в объединённом каталоге «Пресса России». Полные тексты всех вышедших статей и правила для авторов доступны на сайте журнала.

Адрес редакции: 634050, г. Томск, пр. Ленина, д.36, корп. 2, к. 417
Электронный адрес: http://vestnik.tsu.ru/mathematics
Контактный тел./факс: (3822) 529-740
E-mail: vestnik_tgu_mm@math.tsu.ru
H-index: http://elibrary.ru, http://Math-Net.ru

СОДЕРЖАНИЕ

CONTENTS

MATHEMATICS

MECHANICS

МАТЕМАТИКА

УДК: 519.711.3, 514.181.22
DOI 10.17223/19988621/48/1

М.С. Бухтяк

КОНЕЧНО-ЭЛЕМЕНТНАЯ МОДЕЛЬ ПСЕВДОМИНИМАЛЬНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Исследован геометрический подход к моделированию формы тонкого упругого ортотропного материала, натянутого на замкнутый контур. Для моделирования используется класс поверхностей, для которых отношение главных кривизн постоянно. Этот класс (псевдоминимальных поверхностей) введен автором в 2016 г. Для построения поверхности, близкой к псевдоминимальной, применен метод конечных элементов. Построен алгоритм, позволяющий для заданных четырех узлов сетки (не обязательно ортогональной и равномерной) рассчитать положение переменного пятого узла, занимающего положение внутри ячейки. Данный алгоритм является модификацией известного алгоритма, который эффективен для конечно-элементного моделирования минимальных поверхностей. Модификация алгоритма заключается в учете ортотропных свойств материала. Координаты пятого узла вычисляется по координатам четырех узлов с использованием весовых коэффициентов, отражающих соотношение главных кривизн. Алгоритм модифицирован в более удобный алгоритм аналогично тому, как он модифицировался (Е.В. Попов, 1990-е годы) для моделирования минимальных поверхностей. Для апробации алгоритма применена псевдоминимальная поверхность вращения четвертого порядка. Автор имеет основание считать алгоритм пригодным для моделирования.

Ключевые слова: *ортотропия*, *псевдоминимальная поверхность*, *метод конечных элементов*, *алгоритм*, *метод натянутых сеток.*

1. Постановка задачи

Автор продолжает исследование о моделировании деформированного лепестка осесимметричного параболического рефлектора [1–7]. Если главные кривизны поверхности

$$\sum : \overline{r} = \overline{r}(u,v) \in C^2$$

упорядочены номерами (k_1 и k_2), то псевдосредней кривизной веса a называется величина

$$H_a = k_1 + ak_2 ,\ a = \text{const},\ \ a \neq 0 ,$$

а поверхность, для которой

$$H_a = 0 , \tag{1.1}$$

называется псевдоминимальной поверхностью веса a. В [7] приведено дифференциальное уравнение в частных производных, определяющее (локально) класс (1.1).

При $a = 1$ получаем минимальную поверхность. Для приближенного задания минимальных поверхностей в [8] приведен исключительно удачный метод конечно-элементного моделирования. Существенная часть метода – метод натянутых сеток – позволяет свести задачу о минимизации суммы площадей элементарных ячеек конечно-элементной модели к задаче о минимизации суммы квадратов длин ребер.

Естественной представляется задача о построении конечно-элементной модели для поверхности класса (1.1).

2. Ячейка со свободным центральным узлом. Параболическое приближение

Основным элементом конечно-элементной модели будем полагать четырехвершинник *ABCP*, «не слишком удаленный» от моделируемой поверхности и «не слишком отличающийся» от прямоугольника. При этом точки *A*, *B* составляют пару противоположных вершин, а *C*, *P* – еще одну пару противоположных. Обозначим π плоскость, равноудаленную от отрезков $[AB]$ и $[CP]$. Оси *Ox*, *Oy* помещаем в плоскость π таким образом, что точки – вершины – получают координаты $A(-x_0,0,h)$, $B(x_0,0,h)$, $C(x_1, y_1,-h)$, $P(x_2, y_2,-h)$. О взаимном расположении поверхности, плоскости и точек дает представление рис. 1.

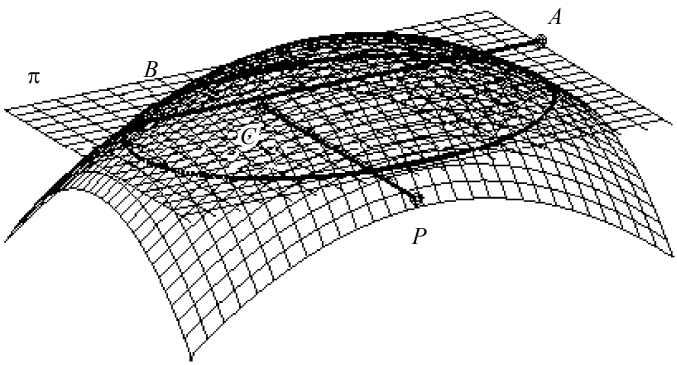


Рис. 1. Взаимное расположение поверхности, плоскости и вершин
Fig. 1. Mutual arrangement of the surface, plane, and vertices

Существенную роль играет аффинный центр четырехугольника

$$M\left(\frac{x_1+x_2}{4},\frac{y_1+y_2}{4},0\right). \tag{2.1}$$

Соприкасающийся параболоид поверхности

$$\sum : \overline{r} = \overline{r}(u,v) \in C^2$$

в декартовой системе координат $(OXYZ)$, присоединенный к точке поверхности O так, что оси OX и OY касаются линий кривизны, описывается уравнением

$$Z = \frac{1}{2}\left(k_1X^2 + k_2Y^2\right). \tag{2.2}$$

Если нормальная плоскость α образует с осью OX угол φ, то кривизна соответствующего нормального сечения

$$k(\alpha) = k_1 \cos^2 \varphi + k_2 \sin^2 \varphi .$$

Нормальное сечение параболоида (2.2) плоскостью α – парабола, кривизна которой в вершине равна $k(\alpha)$. Плоскость π – приближение касательной плоскости, Прямая n, проведенная через срединные точки отрезков [AB], [CP] – приближение нормали поверхности. Плоскости L_{AB}, L_{CP}, проведенные через (AB) и (CP) параллельно n – приближения нормальных плоскостей.

Будем полагать, что в точке M_0 поверхности, окрестность которой моделируется параболоидом (2.2), первое главное направление задано вектором $\boldsymbol{w}$, не обязательно параллельным плоскости π. Его нормированная проекция на плоскость π в системе координат $(OXYZ)$ пусть имеет вид

$$\boldsymbol{v} = \{\cos t, \sin t, 0\} . \tag{2.3}$$

Плоскости L_{AB}, L_{CP} пересекают параболоид (2.2) по параболам G_{AB}, G_{CP}. Их кривизны в вершине, в отличие от кривизн нормальных сечений, считаем неориентированными, а значит, неотрицательными. Их значения равны соответственно

$$k_{AB} = |k_1| \cos^2 c + |k_2| \sin^2 c,$$

$$k_{CP} = \frac{|k_1| \left((x_1 - x_2)\cos t + \sin t (y_1 - y_2) \right)^2}{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} +$$

$$+ |k_2| \left(1 - \frac{\left((x_1 - x_2)\cos t + \sin t (y_1 - y_2) \right)^2}{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \right).$$

Мы строим конечно-элементную модель псевдоминимальной поверхности, следовательно [1], полагаем, что

$$|k_1| = a|k_2|, \quad a > 0, \quad a = \text{const} .$$

Пусть E – срединная точка для [AB], а D – для [CP]. Парабола G_{AB} в плоскости L_{AB} имеет вершину на прямой (ED) (проходящей через аффинный центр (2.1)), а отрезок [AB] служит для неё хордой. Аналогично, парабола G_{CP} в плоскости L_{CP} также имеет вершину в той же точке на той же прямой, а отрезок [CP] – её хорда. При этом кривизны парабол в их общей вершине W суть k_{AB} и k_{CP}. Точка W – вершина параболоида, моделирующего «истинный» параболоид (2.2).

Точка W делит отрезок [ED] в отношении $k_{AB} : k_{CP}$. Записав параметрическое уравнение прямой (ED) в виде

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{M} + \lambda(\boldsymbol{D} - \boldsymbol{E}) ,$$

убеждаемся в том, что

$$\boldsymbol{W} = \boldsymbol{M} + \lambda_0 (\boldsymbol{D} - \boldsymbol{E}) \tag{2.4}$$

при

$$\lambda_0 = \frac{(y_1-y_2)(-1+a)\Big((y_1-y_2)\big(1-2\cos^2 t\big)+2(x_1-x_2)\sin t\cos t\Big)}{\begin{bmatrix} 8(x_1-x_2)(-1+a)\cos t\big((x_1-x_2)\cos t+\sin t(y_1-y_2)\big)+ \\ +4(y_1-y_2)^2 a+4(y_1-y_2)^2+8(x_1-x_2)^2 \end{bmatrix}}.$$

Тем самым положение точки W определено.

3. Модификация метода натянутых сеток

В работе [8] и в ряде других публикаций Е.В. Попов, решая задачу о конечно-элементном моделировании минимальных поверхностей, разработал алгоритм – метод натянутых сеток (МНС), заменяющий минимизацию суммы площадей элементарных треугольников сетки минимизацией суммы квадратов длин ребер сети. В нашем случае отыскание точки (2.4) также можно заменить аналогичной процедурой, приводящей к тому же самому результату, однако минимизируется не сумма квадратов длин отрезков, а сумма их с весовыми коэффициентами. Именно, пусть T – искомая точка. Она находится из условия достижения минимума выражения

$$|AT|^2 K_{CP}+|BT|^2 K_{CP}+|CT|^2 K_{AB}+|PT|^2 K_{AB}.$$

Прямым вычислением устанавливается, что

$$T=W.$$

Отметим, что система координат, в которой совершались построения и вычисления, внутренним образом присоединена к четырехугольнику $ACBP$, и потому результат носит инвариантный характер. Результат применения указанного метода для фиксированных точек A, B, C, P и различных значений a показан на рис. 2 и 3. На них же нанесены параболы, лежащие в основе данного метода.

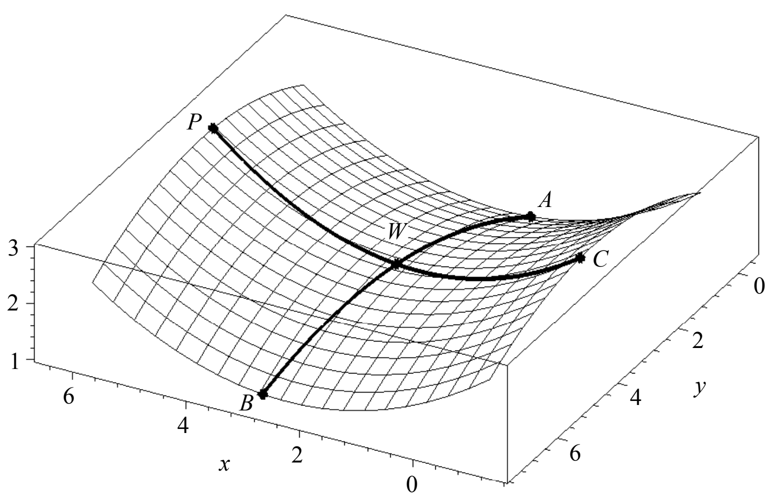


Рис. 2. Кусок поверхности при $a = 1/2$
Fig. 2. Piece of the surface for $a = 1/2$

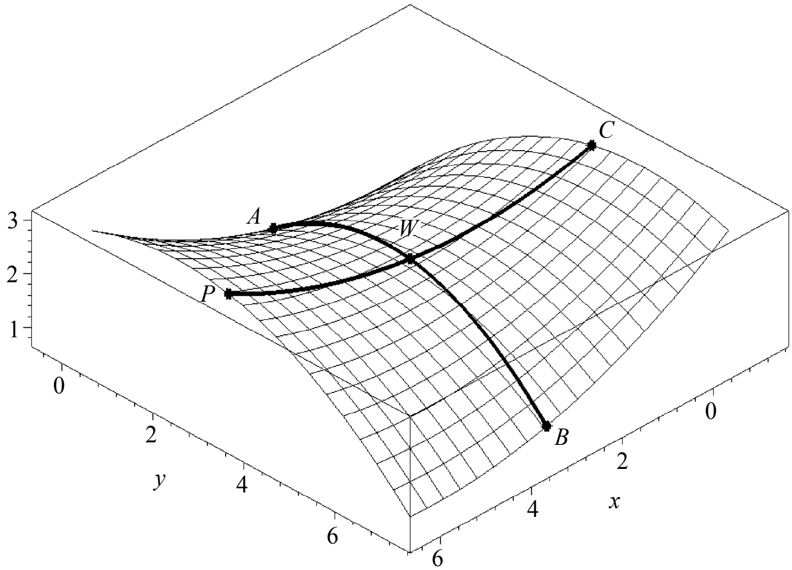


Рис. 3. Поверхность при $a = 2$
Fig. 3. Surface for $a = 2$

4. Прямоугольная сетка

Пусть точки A, B, C, P таковы, что их проекции на некоторую плоскость суть узлы ортогональной сети. Система координат пусть выбрана так, что координаты указанных точек таковы:

$$A(x_0 - h_x, y_0, z_A),\ B(x_0 + h_x, y_0, z_B),\ C(x_0, y_0 - h_y, z_C),\ P(x_0, y_0 + h_y, z_P).$$

Первое главное направление пусть задано вектором (2.3).

Переменный узел – точка M . Найдем положение этой точки, применив модифицированную процедуру метода натянутых сеток, описанную выше. Задача сводится к минимизации функции

$$f(z) = a\left(|AM|^2 + |BM|^2\right) + |CM|^2 + |PM|^2 .$$

В результате получаем точку

$$M\left(x_0, \mathrm{y}_0, \frac{a(z_A + z_B) + z_C + z_P + (z_C + z_P - z_A - z_B)(a-1)\cos^2 t}{2(a+1)}\right).$$

Третью координату точки M представим в виде

$$Z = \frac{a\left(z_p + z_c\right) + z_a + z_b}{2(a+1)} + \frac{\left(-z_c - z_p + z_a + z_b\right)(a-1)t^2}{2(a+1)} + O\left(t^4\right).$$

Для значений *t*, «не слишком уклоняющимся» от нуля, естественно считать слагаемое

$$Z_0 = \frac{a\left(z_p + z_c\right) + z_a + z_b}{2(a+1)} \tag{4.1}$$

главной частью третьей координаты, а слагаемое

$$\Delta Z = \frac{\left(-z_c - z_p + z_a + z_b\right)(a-1)t^2}{2(a+1)} \tag{4.2}$$

оценкой погрешности, привносимой за счет отклонения t от нуля.

Третьей координата есть приближение псевдоминимальной поверхности $Z = F(x, y)$. Полагаем

$$Z_0 = F(x_0, y_0)\,.$$

Удерживая слагаемые до второго порядка малости включительно, принимаем следующие приближения:

$$z_A(x_0, y_0) \approx F(x_0, y_0) - F_x(x_0, y_0)h_x + \frac{1}{2}F_{xx}(x_0, y_0)h_x^2, \quad z_B(x_0, y_0) \approx$$

$$\approx F(x_0, y_0) + F_x(x_0, y_0)h_x + \frac{1}{2}F_{xx}(x_0, y_0)h_x^2,$$

$$z_C(x_0, y_0) \approx F(x_0, y_0) - F_y(x_0, y_0)h_y + \frac{1}{2}F_{yy}(x_0, y_0)h_y^2, \; z_P(x_0, y_0) \approx$$

$$\approx F_0(x_0, y_0) + F_y(x_0, y_0)h_y + \frac{1}{2}F_{yy}(x_0, y_0)h_y^2.$$

В итоге приводим оценку (4.2) к виду

$$\Delta Z \approx \frac{\left(F_{xx}(x_0, y_0){h_x}^2 - F_{yy}(x_0, y_0){h_y}^2\right)(a-1)t^2}{2(a+1)}\,. \tag{4.3}$$

Отметим, что это – оценка абсолютной погрешности. Относительная же погрешность в виде

$$\frac{\Delta Z}{Z_0} \tag{4.4}$$

имеет смысл лишь в том случае, когда в уравнении псевдоминимальной поверхности

$$z = F(x, y) + C, \quad C = \text{const} \tag{4.5}$$

допустимо (из тех или иных соображений) лишь значение $C = 0$, поскольку отношение (4.4) зависит от выбора C.

Относительная (но не безразмерная) оценка, инвариантная относительно сдвигов (4.5), возможна в виде

$$\frac{\Delta Z}{\sqrt{h_x^2 + h_y^2}} = \frac{\left(F_{xx}(x_0, y_0){h_x}^2 - F_{yy}(x_0, y_0){h_y}^2\right)(a-1)t^2}{2(a+1)\sqrt{{h_x}^2 + {h_y}^2}}\,.$$

Перепишем оценку (4.3), применив её в произвольной точке области определения исследуемой функции. Тогда приходим к выражению

$$G(x, y) = \frac{\left(-\left(\frac{\partial^2}{\partial y^2}F(x, y)\right){h_y}^2 + \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}F(x, y)\right){h_x}^2\right)(a-1)t(x, y)^2}{2(a+1)}\,. \tag{4.6}$$

Интегральным средним квадратичным значением погрешности, вносимой отклонением первого главного направления от оси абсцисс, служит величина

$$\Delta = \sqrt{\frac{\int_{y_{\min}}^{y_{\max}} \int_{x_{\min}}^{x_{\max}} \left(G(x,y)\right)^2 dxdy}{\left(x_{\max} - x_{\min}\right)\left(y_{\max} - y_{\min}\right)}}. \tag{4.7}$$

Формула (4.1) положена в основу алгоритма моделирования псевдоминимальной поверхности по массиву точек на границе и заданному числу a – в предположении, что первое главное направление «не слишком отличается» от направления локальной оси Oz.

5. Частный класс

Класс пседоминимальных поверхностей вращения содержит исключительно просто устроенное 1-семейство алгебраических поверхностей четвертого порядка, а именно тех, для которых $a = \frac{1}{2}$. Вокруг оси Ox вращается линия

$$y = 0, \quad z = \frac{x^2}{4C} + C \tag{4.8}$$

(C – параметр семейства). Представление о семействе линий дает рис. 4.

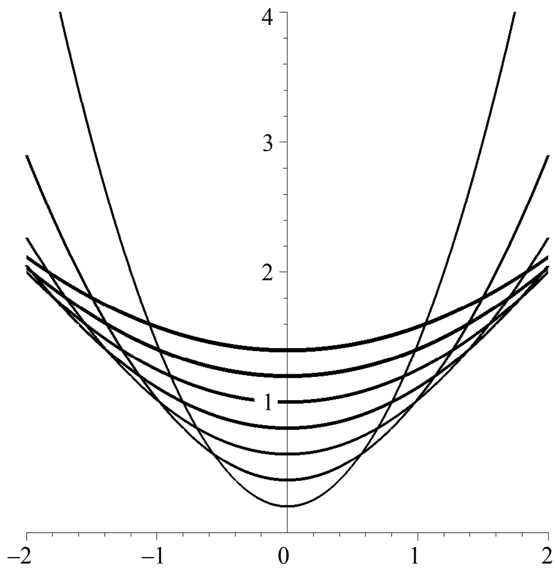


Рис. 4. Линии (4.8) при $C \in \{0.2, 0.4, ..., 1.4\}$.
Наиболее тонкая линия при $C = 0.2$, наиболее толстая – при $C = 1.4$

Fig. 4. Lines (4.1) for $C \in \{0.2, 0.4, ..., 1.4\}$.
The line is thinnest for $C = 0.2$, the thickest, for $C = 1.4$

При $C = 1$ некоторый кусок поверхности есть график функции

$$f(x,y) = \frac{1}{4}\sqrt{x^4 + 8x^2 + 16 - 16y^2}\ . \tag{4.9}$$

Изображение куска поверхности – на рис. 5.

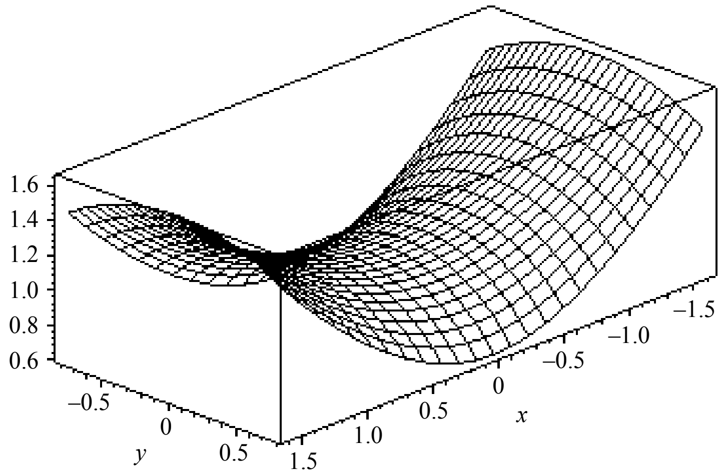


Рис. 5. Изображение куска поверхности
Fig. 5. Image of a surface piece

Следует отметить обстоятельство, благоприятное для конечно-элементного моделирования: проекции линий кривизны первого семейства на координатную плоскость xOy (рис. 6) имеют направления, «не слишком отличающиеся» от направления оси Ox.

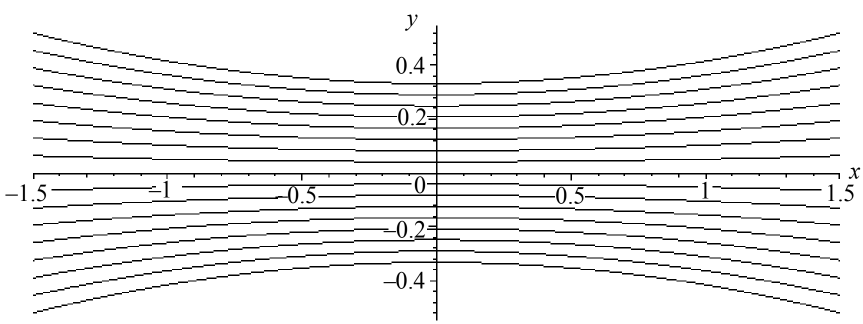


Рис. 6. Проекции линий кривизны первого семейства на координатную плоскость xOy
Fig.6. Projections of curvature lines of the first family onto the coordinate plane xOy

Применен алгоритм, описанный в пункте 4. Построена прямоугольная сетка в плоскости xOy с делениями 40×40. граничные условия – точки на границе прямоугольной области (рис. 7).

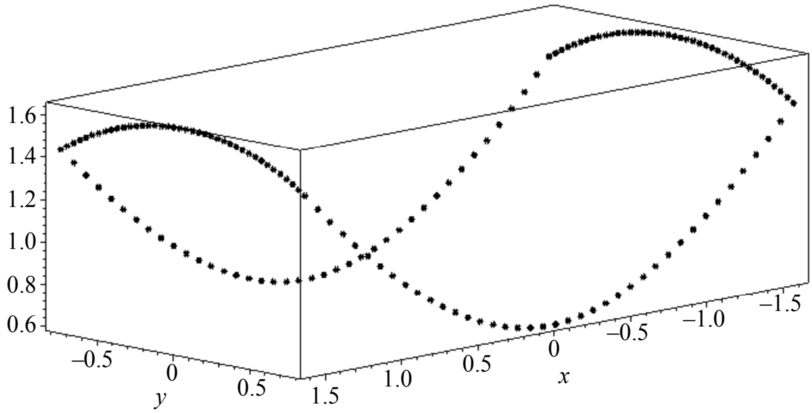


Рис. 7. Массив точек на границе куска поверхности
Fig. 7. Point array on the boundary of the surface piece

На выходе – массив точек, приближающий истинную поверхность (рис. 8). Изображение получено с использованием графического пакета Surfer,

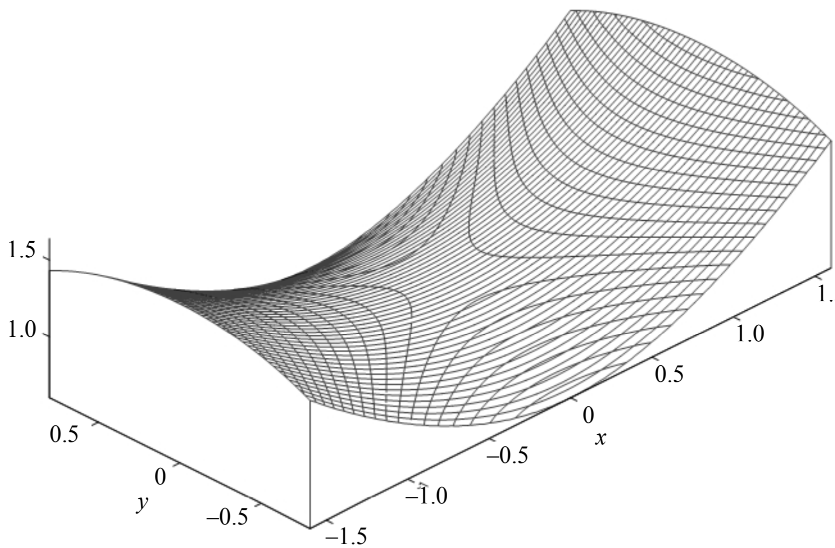


Рис. 8. Изображение массива точек, приближающего исследуемую поверхность
Fig. 8. Image of point array approximating the studied surface

Относительное среднеквадратичное отклонение точечного массива (x_i, y_i, z_i) $(i = 1,\ldots,N)$ от поверхности вычислено по формуле

$$\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{N}\left(f(x_i, y_i) - z_i\right)^2}{N(x_n - x_1)(y_m - y_1)}} \approx 0.00545 .$$

Для подсчета погрешности по формулам (4.6), (4.7) заметим, что в данном случае

$$t(x, y) = \arccos\left(\frac{x^2+4}{\sqrt{x^4+8x^2+16+4x^2y^2}}\right).$$

Вычисления приводят к результату

$$\Delta \approx 0.00001182 .$$

Вклад, вносимый отклонением первого главного направления от направления оси Ox, оказался невелик.

Заключение

Автор полагает, что предложенная работа (наряду с предшествующими) служит прояснению свойств псевдоминимальной поверхности и предлагает инструмент для моделирования поверхностей данного типа. Полученные при этом результаты предполагается применять для конечно-элементного моделирования тех поверхностей, форму которых стремится принять гибкий ортотропный материал (в частности, металлическое сетеполотно). Если иметь в виду цикл работ автора, посвященных геометрическому моделированию формы сетеполотна, входящего в конструкцию орбитальных рефлекторов, то данную статью следует считать (в относительном, конечно, смысле) завершающей.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Бухтяк М.С.* Геометрическое моделирование деформации сетеполотна параболического рефлектора // Математическое моделирование. 2016. Т. 39. № 1. С. 97–106.
2. *Бухтяк М.С.* Дефект отображения для деформированного лепестка сетеполотна // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2016. № 2(40). С. 5–17.
3. *Бухтяк М.С.*, *Соломина А.В.* Об одном инварианте пары поверхностей применительно к раскрою сетеполотна // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2016. № 1(39). С. 13–24.
4. *Бухтяк М.С.*, *Соломина А.В.* Геометрическое моделирование раскроя сетеполотна для осесимметричного рефлектора. Часть 1 // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2015. № 2(34). С. 5–17.
5. *Бухтяк М.С.*, *Соломина А.В.* Геометрическое моделирование раскроя сетеполотна для осесимметричного рефлектора. Часть 2 // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2015. № 4(29). С. 5–14.
6. *Бухтяк М.С.* Обобщение минимальных поверхностей и моделирование формы конструкции из ортотропного материала // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2017. № 1(45). С. 5–24.
7. *Бухтяк М.С.* Составная поверхность, близкая к псевдоминимальной. // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2017. № 2(46). С. 5–24.
8. *Попов Е.В.* Метод натянутых сеток в задачах геометрического моделирования: дис. … д.т.н. – Нижний Новгород, 2001. – 248 с.

Статья поступила 01.05.2017 г.

Bukhtyak M.S. (2017). FINITE ELEMENT MODEL OF A PSEUDOMINIMAL SURFACE. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 48. pp. 5–16

DOI 10.17223/19988621/48/1

The author of the current paper continues his study of the geometrical approach to modelling the shape of a fine elastic orthotropic material spanned on a closed contour. This regards, in particular, a reflecting surface of the reflector antenna, made of metallic mesh. The modelling is based on the class of surfaces with a constant ratio of principal curvatures. This class was introduced by the author in publications of 2016 and is called the class of pseudominimal surfaces (the class of minimal surfaces is its subclass). Pseudominimal surfaces are specified by a partial differential equation, which is very difficult to analyze. A sufficiently appropriate tool to build surfaces close to pseudominimal ones is the finite element method, applied in this article. An essential role is played by the existence theorem according to which the width of pseudominimal surfaces class is two functions of a scalar argument. An algorithm allowing one to calculate the position of a variable fifth node inside the cell for the given four nodes of the grid (the grid is not necessarily orthogonal and uniform) has been developed. This algorithm is a modification of the well-known algorithm which is effective for the finite-element modelling of minimal surfaces. The algorithm modification involves consideration of inequity of the two principal directions at the point of surface due to orthotropy. The coordinates of the fifth node are calculated from the coordinates of the four nodes using the weighting factors reflecting the ratio of the principal curvatures. The algorithm implementing the finite element method is modified to a more convenient algorithm of the stretched grids method (SGM) analogous to the modification (E.V. Popov, 1990s) for minimal surfaces modelling. The class of pseudominimal surfaces of revolution contains a family of algebraic surfaces of the fourth order. This kind of surface has been used for the algorithm testing. The author has good ground to believe that this algorithm is suitable for modelling.

Keywords: orthotropy, pseudo minimal surface, finite elements method, algorithm, stretched grids method.

BUKHTYAK Mikhail Stepanovych (Candidate of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation)
E-mail: bukhtyakm@mail.ru

REFERENCES

1. Bukhtyak M.S. (2016) Geometrical modeling of a metallic mesh deformation of the parabolic reflector. *Mathematical Models and Computer Simulations*. 8(4). pp. 453–461. DOI: 10.1134/S2070048216040050.
2. Bukhtyak M.S. (2016) Defekt otobrazheniya dlya deformirovannogo lepestka setepolotna [Defect of mapping for deformed segment of a metallic mesh]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 2(40). pp. 5–17. DOI: 10.17223/19988621/40/1.
3. Bukhtyak M.S., Solomina A.V. (2016) Ob odnom invariante otobrazheniya poverkhnostey primenitel'no k raskroyu setepolotna [On an invariant of surface mapping as applied to metallic mesh tailoring]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 1(39). pp. 13–24. DOI: 10.17223/19988621/39/2.
4. Bukhtyak M.S., Solomina A.V. (2015) Geometricheskoe modelirovanie raskroya setepolotna dlya osesimmetrichnogo reflektora. Chast' 1 [Geometric modeling of metallic mesh sheet tailoring for an axissymmetric reflector. Part 1]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 2(34). pp. 5–17. DOI: 10.17223/19988621/34/1.
5. Bukhtyak M.S., Solomina A.V. (2015) Geometricheskoe modelirovanie raskroya setepolotna dlya osesimmetricnogo reflektora. Chast' 2 [Geometric modelling of metallic mesh tailoring

for axisymetric refltor. Part 2]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 4(36). pp 5–14. DOI: 10.17223/19988621/36/1.
6. Bukhtyak M.S. (2017) Obobshchenie minimal'nykh poverkhnostey i modelirovanie formy konstruktsii iz ortotropnogo materiala [Generalization of minimal surfaces and simulation of the shape of an orthotropic material construction]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 45. pp. 5–24. DOI: 10.17223/19988621/45/1.
7. Bukhtyak M.S. (2017) Sostavnaja poverhnost', blizkaja k psevdominimal'noj [A composite surface close to pseudo-minimal]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 46. pp. 5–13. DOI: 10.17223/19988621/46/1.
8. Popov E.V. (2001) Metod natyanutykh setok v zadachakh geometricheskogo modelirovaniya [Stretched Grid Method in Problems of Geometric Modeling]. Techn. Doct. Diss. Nizhny Novgorod.

УДК 517. 95
DOI 10.17223/19988621/48/2

Р.К. Тагиев, Р.С. Касымова

КОЭФФИЦИЕНТНАЯ ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ТИПА УПРАВЛЕНИЯ ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ С ДОПОЛНИТЕЛЬНЫМ ИНТЕГРАЛЬНЫМ УСЛОВИЕМ

Рассматривается обратная задача типа управления для эллиптического уравнения. Исследована корректность постановки задачи управления. Доказана дифференцируемость целевого функционала, составленная на основе дополнительного интегрального условия, и найдена формула для его градиента. Установлено необходимое условие оптимальности.

Ключевые слова: *эллиптическое уравнение, обратная задача, интегральное условие*

В работе А.Н.Тихонова [1] предложена идея использования методов оптимального управления для решения обратных задач. Дело в том, что обратные задачи для уравнений с частными производными могут быть поставлены в вариационной форме, т.е. как задачи оптимального управления соответствующими системами. При этом роль причинных характеристик выполняют управляющие воздействия, вследствии изменения которых реализуется тот или иной эффект управления. Эффект управления обычно определяется критериями качества составленными на основе дополнительной информации для состояния системы. Управляющие воздействия должны быть определены таким образом, чтобы получить наилучшую эффект управления. Определение управляющих воздействий по состоянию системы можно трактовать как обратную задачу типа управления.

Если управляющие воздействия входят в коэффициенты уравнений состояния, то такие обратные задачи называют коэффициентными обратными задачами типа управления. В работах [2–9] и др. исследовались коэффициентные обратные задачи типа управления для уравнений с частными производными. Во многих из них дополнительные условия для состояния системы являются локальными. Коэффициентные обратные задачи типа управления с дополнительными нелокальными условиями мало изучены [9].

В данной работе рассматривается коэффициентная обратная задача типа управления для эллиптического уравнения с критерием качества, соответствующим дополнительному интегральному условию. Исследованы вопросы корректности постановки обратной задачи типа управления. Доказана дифференцируемость по Фреше критерия качества и найдено выражение для его градиента. Установлено необходимое условие оптимальности в виде вариационного неравенства.

1. Постановка задачи

Пусть требуется минимизировать функционал

$$J(\upsilon)=\int_0^1\left|u(0,x_2;\upsilon)-\int_0^1 H(x_1,x_2)\,u(x_1,x_2;\upsilon)\,dx_1\right|^2 dx_2 \qquad (1)$$

на решениях $u(x)=u(x\ ;\upsilon)=u(x_1,x_2;\upsilon)$ краевой задачи

$$-\sum_{i=1}^{2}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\upsilon(x_2)\frac{\partial u}{\partial x_i}\right)+q(x)u=f(x),\ x\in\Omega; \tag{2}$$

$$-\upsilon(x_2)\frac{\partial u}{\partial x_1}=g(x),\ x\in\Gamma_{-1}; \tag{3}$$

$$u(x;\upsilon)=0,\ x\in\Gamma\backslash\Gamma_{-1}, \tag{4}$$

соответствующих всем допустимым управлениям $\upsilon=\upsilon(x_2)$ из множества

$$V=\left\{\upsilon=\upsilon(x_2)\in W_2^1(0,1):0<\nu\le\upsilon(x_2)\le\mu,|\upsilon'(x_2)|\le\mu_1 \text{ п.в. на } (0,1)\right\}. \tag{5}$$

Здесь $\Omega=\{x=(x_1,x_2):0<x_i<1,\ i=1,2\}$ – квадрат в R^2 с границей Γ, $\Gamma_{-1}=\{x=(0,x_2):0<x_2<1\}$ – левая вертикальная сторона квадрата Ω, $H(x)=H(x_1,x_2)$, $q(x)$, $f(x)$, $g(x)=g(0,x_2)\equiv g(x_2)$ – заданные функции, удовлетворяющие условиям

$$H(x)\in W_\infty^{0,1}(\Omega),\ q(x)\in L_\infty(\Omega),\ f(x)\in L_2(\Omega),\ g(x_2)\in W_2^1(0,1);$$
$$|H(x)|\le d_1,|\partial H(x)/\partial x_2|\le d_2 \text{ п.в. на } \Omega,\ 0<q_1\le q(x)\le q_2,\ d_1,d_2,q_1,q_2=\text{const}>0.$$

Обозначения используемых в работе функциональных пространств соответствуют принятым в [10, с. 27]. Ниже положительные постоянные, не зависящие от оцениваемых величии и допустимых управлений, обозначим через *M*.

Под решением краевой задачи (2) – (4), соответствующим управлению $\upsilon\in V$, будем понимать обобщенное решение из $W_{2,0}^1(\Omega)$, т.е. функцию $u(x)=u(x;\upsilon)$ из $W_{2,0}^1(\Omega)$, удовлетворяющую интегральному тождеству

$$\int_\Omega\left[\sum_{i=1}^{2}\upsilon(x_2)\frac{\partial u}{\partial x_i}\frac{\partial\eta}{\partial x_i}+q(x)u\eta\right]dx=\int_\Omega f(x)\eta dx+\int_0^1 g(x_2)\eta(0,x_2)dx_2 \tag{6}$$

для всех $\forall\eta=\eta(x)\in W_{2,0}^1(\Omega)$. Здесь $W_{2,0}^1(\Omega)$ – подпространство пространства $W_2^1(\Omega)$, плотным множеством в котором является множество всех функций из $C^1(\bar{\Omega})$, равных нулю вблизи $\Gamma\backslash\Gamma_{-1}$.

При сделанных предположениях краевая задача (2) – (4) однозначно разрешима при каждом заданном $\upsilon\in V$ [10, с. 200]. Кроме того, можно показать, что обобщенное решение из $W_{2,0}^1(\Omega)$ краевой задачи (2) – (4) принадлежит также пространству $W_{2,0}^2(\Omega)=W_2^2(\Omega)\cap W_{2,0}^1(\Omega)$, удовлетворяет уравнению (2) при почти всех $x\in\Omega$ и справедлива оценка

$$\|u\|_{2,\Omega}^{(2)}\le M\left[\|f\|_{2,\Omega}+\|g\|_{2,\Gamma_{-1}}^{(1)}\right]. \tag{7}$$

Отсюда и из ограниченности вложений $W_{2,0}^2(\Omega)\to W_2^1(\Gamma_{-1})$, $W_{2,0}^1(\Omega)\to L_4(\Omega)$ [11, с.78] следует, что также верна оценка

$$\|u\|_{2,\Gamma_{-1}}^{(1)}+\|u_x\|_{4,\Omega}\le M\left[\|f\|_{2,\Omega}+\|g\|_{2,\Gamma_{-1}}^{(1)}\right]. \tag{8}$$

Из условия $|H(x)| \le d_1$ п.в. на Ω и из оценок (7), (8) следует, что функционал (1) определен на V и принимает конечные значения.

Задача (1) – (5) тесно связана с коэффициентной обратной задачей, заключающейся в определении функций $\{\upsilon(x_2), u(x)\}$, удовлетворяющих условиям (2) – (5) и дополнительному интегральному условию

$$u(0,x_2) = \int_0^1 H(x_1,x_2)u(x_1,x_2)\,dx_1, 0 < x_2 < 1. \tag{9}$$

Целевой функционал (1) является функционалом невязки в $L_2(0,1)$, соответствующей условию (9). Если в задаче (1) – (5) окажется, что существует управление $\upsilon_* \in V$, такое, что $J(\upsilon_*) = J_* \equiv \inf\{J(\upsilon) : \upsilon \in V\} = 0$, то это управление решает обратную задачу (2) – (5), (9).

Задача (1) – (5) является задачей оптимального управления для эллиптического уравнения с управлениями в коэффициентах. Такие задачи в других постановках исследованы в работах [12–14] и др.

2. Корректность постановки задачи

Следующая теорема показывает, что задача (1) – (5) корректно поставлена в слабой топологии пространства $W_2^1(0,1)$.

Теорема 1. Пусть выполнены условия, принятые в п.1. Тогда множество оптимальных управлений задачи (1) – (5) $V_* = \{\upsilon_* \in V : J(\upsilon_*) = J_*\}$ не пусто, слабо компактно в $W_2^1(0,1)$ и любая минимизирующая последовательность $\{\upsilon_n\} \subset V$ функционала (1) слабо в $W_2^1(0,1)$ сходится к множеству V_*.

Доказательство. Покажем, что функционал (1) слабо в $W_2^1(0,1)$ непрерывен на множестве V. Пусть $\upsilon \in V$ – некоторый элемент, $\{\upsilon_n\} \subset V$ – произвольная последовательность, такая, что

$$\upsilon_n(x_2) \to \upsilon(x_2) \text{ слабо в } W_2^1(0,1). \tag{10}$$

Из (10) и компактности вложения $W_2^1(0,1) \to C[0,1]$ [11, с. 78] следует, что

$$\upsilon_n(x_2) \to \upsilon(x_2) \text{ сильно в } C[0,1]. \tag{11}$$

Кроме того, в силу однозначной разрешимости краевой задачи (2) – (4), каждому управлению $\upsilon_n \in V$ соответствует единственное решение $u_n(x) = u(x;\upsilon_n)$ из $W_{2,0}^2(\Omega)$ задачи (2) – (4) и справедлива оценка

$$\|u_n\|_{2,\Omega}^{(2)} \le M, n = 1,2,\dots, \tag{12}$$

т.е. последовательность $\{u_n\}$ равномерно ограничена в пространстве $W_{2,0}^2(\Omega)$.

Тогда из (12) и компактности вложений $W_{2,0}^2(\Omega) \to W_{2,0}^1(\Omega)$, $W_{2,0}^2(\Omega) \to W_2^1(\Gamma_{-1})$ следует, что из последовательности $\{u_n\}$ можно извлечь подпоследовательность $\{u_{n_m}\}$, такую, что

$$u_{n_m}(x) \to u(x) \text{ слабо в } W_{2,0}^2(\Omega),$$

$$\text{сильно в } W_{2,0}^1(\Omega) \text{ и в } W_2^1(\Gamma_{-1}), \tag{13}$$

где $u(x)$ – некоторый элемент из $W_{2,0}^2(\Omega)$.

Покажем, что $u(x)=u(x;\upsilon)$, $x\in\Omega$, т.е. $u(x)$ является решением задачи (2) – (4), соответствующим управлению $\upsilon\in V$. Ясно, что справедливы тождества

$$\int_\Omega\left[\sum_{i=1}^2 \upsilon_{n_m}(x_2)\frac{\partial u_{n_m}}{\partial x_i}\frac{\partial\eta}{\partial x_i}+q(x)u_{n_m}\eta\right]dx=\int_\Omega f(x)\eta dx+\int_0^1 g(x_2)\eta(0,x_2)dx_2,$$

$$\forall\eta=\eta(x)\in W_{2,0}^1(\Omega). \tag{14}$$

Используя ограничение $0<\nu\le\upsilon(x_2)\le\mu$ п.в. на Ω, неравенство Коши – Буняковского и соотношения (11), (13), получаем

$$\left|\int_\Omega\sum_{i=1}^2 \upsilon_{n_m}(x_2)\frac{\partial u_{n_m}}{\partial x_i}\frac{\partial\eta}{\partial x_i}dx-\int_\Omega\sum_{i=1}^2\upsilon(x_2)\frac{\partial u}{\partial x_i}\frac{\partial\eta}{\partial x_i}dx\right|\le$$

$$\le\left|\int_\Omega\sum_{i=1}^2 \upsilon_{n_m}(x_2)\left(\frac{\partial u_{n_m}}{\partial x_i}-\frac{\partial u}{\partial x_i}\right)\frac{\partial\eta}{\partial x_i}dx\right|+\left|\int_\Omega\left[\upsilon_{n_m}(x_2)-\upsilon(x_2)\right]\frac{\partial u}{\partial x_i}\frac{\partial\eta}{\partial x_i}dx\right|\le$$

$$\le\mu\left\|\frac{\partial u_{n_m}}{\partial x_i}-\frac{\partial u}{\partial x_i}\right\|_{2,\Omega}\cdot\left\|\frac{\partial\eta}{\partial x_i}\right\|_{2,\Omega}+\left\|\upsilon_{n_m}(x_2)-\upsilon(x_2)\right\|_{C[0,1]}\cdot\sum_{i=1}^2\left\|\frac{\partial u}{\partial x_i}\right\|_{2,\Omega}\cdot\left\|\frac{\partial\eta}{\partial x_i}\right\|_{2,\Omega}\to 0, \tag{15}$$

при $m\to\infty$.

Тогда переходя к пределу при $m\to\infty$ в равенстве (14) и учитывая соотношения (13), (15), получаем, что функция $u(x)$ удвлетворяет тождеству (6). Отсюда и из включения $u(x)\in W_{2,0}^2(\Omega)$ следует, что $u(x)=u(x;\upsilon)$, т.е. $u(x)$ является решением задачи (2) – (4), соответстующим управлению $\upsilon\in V$.

Используя единственность решения задачи (1) – (3), соответстующего управлению $\upsilon\in V$, нетрудно показать, что соотношение (13) с функцией $u(x)=u(x;\upsilon)$ справедливо не только для подпоследовательности $\{u_{n_m}\}$, но и для всей последовательности $\{u_n\}$, т.е.

$$u_n(x)=u(x;\upsilon_n)\to u(x)=u(x;\upsilon) \text{ слабо в } W_{2,0}^2(\Omega),$$

$$\text{сильно в } W_{2,0}^1(\Omega) \text{ и в } W_2^1(\Gamma_{-1}). \tag{16}$$

Покажем, что $J(\upsilon_n)\to J(\upsilon)$ при $n\to\infty$. Используя равенство (1), очевидное неравенство $(a+b)^2\le 2\left(a^2+b^2\right)$, неравенство Коши – Буняковского и условию $|H(x)|\le d_1$ п.в. на Ω, имеем

$$|J(\upsilon_n)-J(\upsilon)|\le\left\{\int_0^1\left[|u(0,x_2;\upsilon_n)-u(0,x_2;\upsilon)|+\right.\right.$$

$$\left.\left.+\int_0^1|H(x_1,x_2)|\cdot|u(x_1,x_2;\upsilon_n)-u(x_1,x_2;\upsilon)|dx_1\right]^2dx_2\right\}^{1/2}\times$$

$$\times\left\{\int_0^1\left[|u(0,x_2;\upsilon_n)|+|u(0,x_2;\upsilon)|+\int_0^1|H(x_1,x_2)|\cdot|u(x_1,x_2;\upsilon_n)|dx_1+\right.\right.$$

$$\left.\left.+\int_0^1|H(x_1,x_2)|\cdot|u(x_1,x_2;\upsilon)|dx_1\right]^2dx_2\right\}^{1/2}\le 2\sqrt{2}\left\{\int_0^1\left[|u(0,x_2;\upsilon_n)-u(0,x_2;\upsilon)|^2+\right.\right.$$

$$\left.\left.+\int_0^1H^2(x_1,x_2)dx_1\cdot\int_0^1|u(x_1,x_2;\upsilon_n)-u(x_1,x_2;\upsilon)|^2dx_1\right]dx_2\right\}^{1/2}\times$$

$$\times\left\{\int_0^1\left[|u(0,x_2;\upsilon_n)|^2+|u(0,x_2;\upsilon)|^2+\int_0^1H^2(x_1,x_2)dx_1\cdot\int_0^1|u\ \ (x_1,x_2;\upsilon_n)|^2dx_1+\right.\right.$$

$$\left.\left.+\int_0^1H^2(x_1,x_2)dx_1\cdot\int_0^1|u(x_1,x_2;\upsilon)|^2dx_1\right]dx_2\right\}^{1/2}\le 2\sqrt{2}\left[\|u_n-u\|_{2,\Gamma_{-1}}+d_1\|u_n-u\|_{2,\Omega}\right]\times$$

$$\times\left[\|u_n\|_{2,\Gamma_{-1}}+\|u\|_{2,\Gamma_{-1}}+d_1\left(\|u_n\|_{2,\Omega}+\|u\|_{2,\Omega}\right)\right].$$

Отсюда, используя оценки (7), (8), (12) и соотношения (15), получаем, что $J(\upsilon_n)\to J(\upsilon)$ при $n\to\infty$, т.е. функционал $J(\upsilon)$ слабо в $W_2^1(0,1)$ непрерывен на V. Кроме того, множество V, определяемое равенством (5), выпукло, замкнуто и ограничено в гильбертовом пространстве $W_2^1(0,1)$ и поэтому слабо компактно в $W_2^1(0,1)$ [15, с. 51]. Тогда применяя результать из [15, с. 49], получаем, что справедливы утверждения теоремы 1. Теорема 1 доказана.

3. Дифференцируемость целевого функционала и условие оптимальности

Пусть $\psi=\psi(x)=\psi(x;\upsilon)$ – обобщенное решение из $W_{2,0}^1(\Omega)$ сопряженной краевой задачи, соответствующей задаче (1) – (5)

$$-\sum_{i=1}^2\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\upsilon(x_2)\frac{\partial\psi}{\partial x_i}\right)+q(x)\psi=$$

$$=-2H(x_1,x_2)\left[u(0,x_2;\upsilon)-\int_0^1H(\xi_1,x_2)u(\xi_1,x_2;\upsilon)d\xi_1\right],\ x\in\Omega; \tag{17}$$

$$-\upsilon(x_2)\frac{\partial\psi}{\partial x_1}=2\left[u(0,x_2;\upsilon)-\int_0^1H(\xi_1,x_2)u(\xi_1,x_2;\upsilon)d\xi_1\right],\ x\in\Gamma_{-1}; \tag{18}$$

$$\psi(x;\upsilon)=0,\ x\in\Gamma\backslash\Gamma_{-1}. \tag{19}$$

Под решением краевой задачи (17) – (19), соответствующим управлению $\upsilon \in V$, будем понимать обобщенное решение из $W_{2,0}^1(\Omega)$, т.е функцию $\psi(x) = \psi(x;\upsilon) \in W_{2,0}^1(\Omega)$, удовлетворяющую интегральному тождеству

$$\int_\Omega \left[\sum_{i=1}^2 \upsilon(x_2) \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \frac{\partial \eta}{\partial x_i} + q(x)\psi\eta \right] dx =$$

$$= -2\int_\Omega H(x_1,x_2)\left[u(0,x_2;\upsilon) - \int_0^1 H(\xi_1,x_2) u(\xi_1,x_2;\upsilon)\,dx_1 \right]\eta\,dx -$$

$$-2\int_0^1 \left[u(0,x_2;\upsilon) - \int_0^1 H(\xi_1,x_2) u(\xi_1,x_2;\upsilon)\,dx_1 \right]\eta(0,x_2)\,dx_2 \tag{20}$$

при любой функции $\eta = \eta(x) \in W_{2,0}^1(\Omega)$.

Введем обозначения:

$$F(x) = -2\left[u(0,x_2;\upsilon) - \int_0^1 H(\xi_1,x_2) u(\xi_1,x_2;\upsilon)\,d\xi_1 \right] H(x_1,x_2),\ x \in \Omega,$$

$$p(x_2) = 2\left[u(0,x_2;\upsilon) - \int_0^1 H(\xi_1,x_2) u(\xi_1,x_2;\upsilon)\,d\xi_1 \right],\ x_2 \in (0,1).$$

Покажем, что $F(x) \in L_2(\Omega)$, $p(x_2) \in W_2^1(0,1)$. Используя очевидное неравенство $(a+b)^2 \le 2\left(a^2+b^2\right)$, неравенство Коши – Буняковского и ограничения $|H(x)| \le d_1, |\partial H(x)/\partial x_2| \le d_2$ п.в. на Ω, имеем

$$\int_\Omega F^2(x)\,dx = 4\int_\Omega \left| u(0,x_2;\upsilon) - \int_0^1 H(\xi_1,x_2) u(\xi_1,x_2;\upsilon)\,d\xi_1 \right|^2 H^2(x)\,dx \le$$

$$\le 8\int_\Omega \left[\int_0^1 u^2(0,x_2;\upsilon) + \int_0^1 H^2(\xi_1,x_2)\,d\xi_1 \cdot \int_0^1 u^2(\xi_1,x_2;\upsilon)\,d\xi_1 \right] H^2(x)\,dx \le$$

$$\le 8d_1^2 \left[\|u\|_{2,\Gamma_{-1}}^2 + d_1^2 \|u\|_{2,\Omega}^2 \right]; \tag{21}$$

$$\int_0^1 \left[|p(x_2)|^2 + |p'(x_2)|^2 \right] dx_2 = 4\int_0^1 \left\{ \left| u(0,x_2;\upsilon) - \int_0^1 H(\xi_1,x_2) u(\xi_1,x_2;\upsilon)\,d\xi_1 \right|^2 + \right.$$

$$\left. + \left| \frac{\partial u(0,x_2;\upsilon)}{\partial x_2} - \int_0^1 \frac{\partial H(\xi_1,x_2)}{\partial x_2} u(\xi_1,x_2;\upsilon)\,d\xi_1 - \int_0^1 H(\xi_1,x_2) \frac{\partial u(\xi_1,x_2;\upsilon)}{\partial x_2}\,d\xi_1 \right|^2 \right\} dx_2 \le$$

$$\le 4\int_0^1 \left[2u^2(0,x_2;\upsilon) + 2\int_0^1 H^2(\xi_1,x_2)\,d\xi_1 \cdot \int_0^1 u^2(\xi_1,x_2;\upsilon)\,d\xi_1 + 2\left| \frac{\partial u(0,x_2;\upsilon)}{\partial x_2} \right|^2 + \right.$$

$$+4\int_0^1\left|\frac{\partial H(\xi_1,x_2)}{\partial x_2}\right|^2 d\xi_1\cdot\int_0^1 u^2(\xi_1,x_2;\upsilon)d\xi_1+4\int_0^1 H^2(\xi_1,x_2)d\xi_1\times$$

$$\times\int_0^1\left|\frac{\partial u(\xi_1,x_2;\upsilon)}{\partial x_2}\right|^2 d\xi_1\Bigg]dx_2\le 8\Bigg[\|u\|^2_{2,\Gamma_{-1}}+d_1^2\|u\|^2_{2,\Omega}+\left\|\frac{\partial u}{\partial x_2}\right\|^2_{2,\Gamma_{-1}}+$$

$$+2d_2^2\|u\|^2_{2,\Omega}+2d_1^2\left\|\frac{\partial u}{\partial x_2}\right\|^2_{2,\Omega}\Bigg].\tag{22}$$

Отсюда и из оценок (7), (8) следует, что $F(x)\in L_2(\Omega)$, $p(x_2)\in W_2^1(0,1)$.

Тогда из результатов монографии [10, с. 200] следует, что краевая задача (17) – (19) однозначно разрешима в $W^1_{2,0}(\Omega)$ при каждом функсированном $\upsilon\in V$, его обобщенное решение из $W^1_{2,0}(\Omega)$ принадлежит также пространству $W^2_{2,0}(\Omega)$ и справедлива оценка

$$\|\psi\|^{(2)}_{2,\Omega}\le M\left[\|F\|_{2,\Omega}+\|p\|^{(1)}_{2,\Gamma_{-1}}\right].$$

Учитывая здесь оценки (21), (22), (7), получаем

$$\|\psi\|^{(2)}_{2,\Omega}\le M\left[\|f\|_{2,\Omega}+\|g\|^{(1)}_{2,\Gamma_{-1}}\right].\tag{23}$$

Отсюда и из ограниченности вложений $W^2_{2,0}(\Omega)\to W_2^1(\Gamma_{-1})$, $W^1_{2,0}(\Omega)\to L_4(\Omega)$ [11, с. 78] следует, что верна также оценка

$$\|\psi\|^{(1)}_{2,\Gamma_{-1}}+\|\psi_x\|_{4,\Omega}\le M\left[\|f\|_{2,\Omega}+\|g\|^{(1)}_{2,\Gamma_{-1}}\right].\tag{24}$$

Введем еще одну вспомогательную краевую задачу для определения функции $\omega(x_2)=\omega(x_2;\upsilon)$ из условий

$$-\omega''+\omega=\int_0^1\sum_{i=1}^2\frac{\partial u}{\partial x_i}\frac{\partial\psi}{\partial x_i}dx_1,\, 0<x_2<1;\tag{25}$$

$$\omega'(0)=\omega'(1)=0.\tag{26}$$

Под решением краевой задачи (25), (26) при фиксированном $\upsilon\in V$ будем понимать функцию $\omega(x_2)=\omega(x_2;\upsilon)\in W_2^1(0,1)$, удовлетворяющую интегральному тождеству

$$\int_0^1(\omega'\eta'+\omega\eta)dx_2=\int_0^1\left(\int_0^1\sum_{i=1}^2\frac{\partial u}{\partial x_i}\frac{\partial\psi}{\partial x_i}dx_1\right)\eta dx_2\tag{27}$$

при любой функции $\eta=\eta(x_2)\in W_2^1(0,1)$.

Из включений $\dfrac{\partial u}{\partial x_i},\dfrac{\partial\psi}{\partial x_i}\in L_4(\Omega)$ следует, что правая часть уравнения (25) принадлежит пространству $L_2(0,1)$. Тогда из результатов работы [10, с. 200] следует, что краевая задача (25), (26), при заданном $\upsilon\in V$, имеет единственное обобщенное решение из $W_2^1(0,1)$ и справедлива оценка

$$\|\omega\|_{2,(0,1)}^{(1)} \le M \sum_{i=1}^{2} \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{4,\Omega} \cdot \left\| \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right\|_{4,\Omega} .$$

Отсюда и из оценок (8), (24) следует, что верна оценка

$$\|\omega\|_{2,(0,1)}^{(1)} \le M \left(\|f\|_{2,\Omega} + \|g\|_{2,\Gamma_{-1}}^{(1)} \right). \tag{28}$$

Теорема 2. Пусть выполнены условия при постановке задачи (1) – (5). Тогда функционал (1) непрерывно дифференцируем по Фреше на V и его градиент в произвольной точке $\upsilon \in V$ определяется равенством

$$J'(\upsilon) = \omega(x_2;\upsilon), 0 < x_2 < 1 . \tag{29}$$

Доказательство. Пусть $\upsilon, \upsilon + \Delta\upsilon \in V$ – произвольные управления, $\Delta\upsilon \in W_2^1(0,1)$ и $\Delta u(x) = u(x;\upsilon+\Delta\upsilon) - u(x;\upsilon)$, $x \in \Omega$. Из (6) следует, что Δu удовлетворяет тождеству

$$\int_\Omega \left[\sum_{i=1}^{2} (\upsilon(x_2) + \Delta\upsilon(x_2)) \frac{\partial \Delta u}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x_i} + q \Delta u \eta \right] dx =$$

$$= -\int_\Omega \sum_{i=1}^{2} \Delta\upsilon(x_2) \frac{\partial u}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x_i} dx, \forall \eta = \eta(x) \in W_{2,0}^1(\Omega). \tag{30}$$

Для функции Δu справедлива оценка [10, с. 200]:

$$\|\Delta u\|_{2,\Omega}^{(1)} \le M \sum_{i=1}^{2} \left\| \Delta\upsilon \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{2,\Omega} . \tag{31}$$

Используя неравенство Коши – Буняковского и оценки (7), имеем

$$\sum_{i=1}^{2} \left\| \Delta\upsilon \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{2,\Omega} \le \|\Delta\upsilon\|_{2,(0,1)} \sum_{i=1}^{2} \left\| \frac{\partial u}{\partial x_i} \right\|_{2,\Omega} \le M \|\Delta\upsilon\|_{2,(0,1)}^{(1)} .$$

Учитывая эту оценку в (31), получаем

$$\|\Delta u\|_{2,\Omega}^{(1)} \le M \|\Delta\upsilon\|_{2,(0,1)}^{(1)} . \tag{32}$$

Отсюда и из ограниченности вложения $W_{2,0}^1(\Omega) \to L_2(\Gamma_{-1})$ следует, что верна также оценка

$$\|\Delta u\|_{2,\Gamma_{-1}} \le M \|\Delta\upsilon\|_{2,(0,1)}^{(1)} . \tag{33}$$

Приращение функционала (1) имеет вид

$$\Delta J(\upsilon) = J(\upsilon+\Delta\upsilon) - J(\upsilon) = 2\int_0^1 \left\{ \left[u(0,x_2;\upsilon) - \int_0^1 H(x_1,x_2) u(x_1,x_2;\upsilon) dx_1 \right] \times \right.$$

$$\left. \times \left[\Delta u(0,x_2) - \int_0^1 H(x_1,x_2) \Delta u(x_1,x_2) dx_1 \right] \right\} dx_2 +$$

$$+ \int_0^1 \left| \Delta u(0,x_2) - \int_0^1 H(x_1,x_2) \Delta u(x_1,x_2) dx_1 \right|^2 dx_2 . \tag{34}$$

Если в тождестве (20) положим $\eta = \Delta u$, а в (30) положим $\eta = \psi$ и полученные равенства вычтем, то получим равенство

$$2\int_0^1 \left\{ \left[u(0,x_2;\upsilon) - \int_0^1 H(x_1,x_2) u(x_1,x_2;\upsilon) dx_1 \right] \times \right.$$

$$\left. \times \left[\Delta u(0,x_2) - \int_0^1 H(x_1,x_2) \Delta u(x_1,x_2) dx_1 \right] \right\} dx_2 =$$

$$= \int_\Omega \sum_{i=1}^2 \Delta\upsilon(x_2) \frac{\partial u}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x_i} dx + \int_\Omega \sum_{i=1}^2 \Delta\upsilon(x_2) \frac{\partial \Delta u}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x_i} dx .$$

Учитывая это равенство в (34), имеем

$$\Delta J(\upsilon) = \int_\Omega \sum_{i=1}^2 \frac{\partial u}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \Delta\upsilon dx + R , \tag{35}$$

где
$$R = \int_0^1 \left| \Delta u(0,x_2) - \int_0^1 H(x_1,x_2) \Delta u(x_1,x_2) dx_1 \right|^2 dx_2 +$$

$$+ \int_\Omega \sum_{i=1}^2 \Delta\upsilon(x_2) \frac{\partial \Delta u}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial x_i} dx. \tag{36}$$

Полагая в (27) $\eta = \Delta\upsilon$ и учитывая полученное равенство в (35), имеем

$$\Delta J(\upsilon) = \int_0^1 (\omega' \Delta\upsilon' + \omega \Delta\upsilon) dx_2 + R . \tag{37}$$

Теперь проведем оценку остаточного члена R, определяемого равенством (36). Используя (36), очевидное неравенство $(a+b)^2 \le 2\left(a^2+b^2\right)$, неравенство Коши – Буняковского и оценки (32), (33), (23), получаем

$$|R| \le 2\int_0^1 \left[|\Delta u(0,x_2)|^2 + \left(\int_0^1 H(x_1,x_2) \Delta u(x_1,x_2) dx_1 \right)^2 \right] dx_2 +$$

$$+ \|\Delta\upsilon\|_{C[0,1]} \sum_{i=1}^2 \left\| \frac{\partial \Delta u}{\partial x_i} \right\|_{2,\Omega} \cdot \left\| \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right\|_{2,\Omega} \le 2\left[\|\Delta u\|_{2,\Gamma_{-1}}^2 + d_1^2 \|\Delta u\|_{2,\Omega}^2 \right] +$$

$$+ \|\Delta\upsilon\|_{2,(0,1)}^{(1)} \sum_{i=1}^2 \left\| \frac{\partial \Delta u}{\partial x_i} \right\|_{2,\Omega} \cdot \left\| \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right\|_{2,\Omega} \le M \left(\|\Delta\upsilon\|_{2,(0,1)}^{(1)} \right)^2 .$$

Учитывая это неравенство в (35), получаем, что функцонал (1) дифференцируем по Фреше на множестве V .

Покажем, что отображение $\upsilon \to J'(\upsilon)$ непрерывно действует из $W_2^1(0,1)$ в $W_2^1(0,1)$. Пусть

$$\Delta\psi(x) = \psi(x;\upsilon+\Delta\upsilon) - \psi(x;\upsilon),\ \psi(x) = \psi(x;\upsilon),$$
$$\Delta\omega(x_2) = \omega(x_2;\upsilon+\Delta\upsilon) - \omega(x_2;\upsilon),\ \omega(x_2) = \omega(x_2;\upsilon).$$

Из (20) следует,что функция $\Delta\psi(x)$ удовлетворяет интегральному тождеству

$$\int_\Omega \left[\sum_{i=1}^{2} (\upsilon(x_2)+\Delta\upsilon(x_2)) \frac{\partial \Delta\psi}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x_i} + q\Delta\psi\eta \right] dx = -\int_\Omega \sum_{i=1}^{2} \Delta\upsilon(x_2) \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial x_i} dx -$$

$$-2\int_\Omega \left[\Delta u(0,x_2) - \int_0^1 H(\xi_1,x_2)\Delta u(\xi_1,x_2)d\xi_1 \right] H(x)\eta dx -$$

$$-2\int_0^1 \left[\Delta u(0,x_2) - \int_0^1 H(\xi_1,x_2)\Delta u(\xi_1,x_2)d\xi_1 \right] \eta(0,x_2)dx_2 .$$

Для функции $\Delta\psi$ справедлива оценка [10, с. 200]

$$\|\Delta\psi\|_{2,\Omega}^{(1)} \le M \left\{ \sum_{i=1}^{2} \left\| \Delta\upsilon \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right\|_{2,\Omega} + \right.$$

$$+ \left\| \left[\Delta u(0,x_2) - \int_0^1 H(\xi_1,x_2)\Delta u(\xi_1,x_2)d\xi_1 \right] H(x) \right\|_{2,\Omega} +$$

$$\left. + \left\| \Delta u(0,x_2) - \int_0^1 H(\xi_1,x_2)\Delta u(\xi_1,x_2)d\xi_1 \right\|_{2,\Gamma_{-1}} \right\}.$$

Оценивая правую часть этого неравенства и используя оценки (23), (32) и (33), получаем оценку

$$\|\Delta\psi\|_{2,\Omega}^{(1)} \le M \|\Delta\upsilon\|_{2,\Gamma_{-1}}^{(1)} . \qquad (38)$$

Из (25), (26) следует, что $\Delta\omega$ является обобщенным решением из $W_2^1(0,1)$ краевой задачи

$$-\Delta\omega'' + \Delta\omega = \int_0^1 \sum_{i=1}^{2} \left(u_{x_i}\Delta\psi_{x_i} + \Delta u_{x_i}\psi_{x_i} + \Delta u_{x_i}\Delta\psi_{x_i} \right) dx_1 ,$$

$$\Delta\omega'(0) = \Delta\omega'(1) = 0 .$$

Для решения этой задачи справедлива оценка [10, с. 200]:

$$\|\Delta\omega\|_{2,(0,1)}^{(1)} \le M \left\| \int_0^1 \sum_{i=1}^{2} \left(u_{x_i}\Delta\psi_{x_i} + \Delta u_{x_i}\psi_{x_i} + \Delta u_{x_i}\Delta\psi_{x_i} \right) dx_1 \right\|_{2,(0,1)} .$$

Оценивая правую часть этого неравенства и используя оценки (8), (24), (31) и (35), получаем оценку

$$\|\Delta\omega\|_{2,(0,1)}^{(1)} \le M \|\Delta\upsilon\|_{2,(0,1)}^{(1)} \cdot \left[1 + \|\Delta\upsilon\|_{2,(0,1)}^{(1)} \right].$$

Отсюда и из (29) получаем

$$\|J'(\upsilon+\Delta\upsilon) - J'(\upsilon)\|_{2,(0,1)}^{(1)} = \|\Delta\psi\|_{2,(0,1)} \le M \|\Delta\upsilon\|_{2,(0,1)}^{(1)} \cdot \left[1 + \|\Delta\upsilon\|_{2,(0,1)}^{(1)} \right].$$

Отсюда следует, что отображение $\upsilon \to J'(\upsilon)$ действует непрерывно из $W_2^1(0,1)$ в $W_2^1(0,1)$. Теорема 2 доказана.

Необходимое условие оптимальности в задаче (1) – (5) устанавливает

Теорема 3. Пусть выполнены условия при постановке задачи (1) – (5). Тогда для оптимальности управления $\upsilon_* \in V$ в задаче (1) – (5) необходимо, чтобы выполнялось неравенство

$$\int_0^1 \omega(x_2;\upsilon_*)[\upsilon(x_2)-\upsilon_*(x_2)]dx_2 \geq 0$$

для любого $\upsilon \in V$, где $\omega(x_2;\upsilon_*)$ – решение задачи (25), (26) при $\upsilon = \upsilon_*$.

Справедливость утверждения теоремы 3 следует из теоремы 5 работы [15, с. 28].

ЛИТЕРАТУРА

1. *Тихонов А.Н.* О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации // ДАН СССР. 1963. Т. 151. № 3. С. 501–504.
2. *Искендеров А.Д.* О вариационных постановках многомерных обратных задач математической физики // ДАН СССР. 1984. Т. 274. № 3. С. 531–533.
3. *Алифанов О.А.*, *Артюхин Е.А.*, *Румянцев С.В.* Эксеремальные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1988. 288 с.
4. *Karchevsky A.L.* Properties the misfit functional for a nonlinear one – dimensional coefficient hyperbolic inverse problem // J. Inverse III – Posed. Probl. 1997. V. 5. No 2. P. 139–165.
5. *Кабанихин С.И.*, *Искаков К.Т.* Обоснование метода наискорейшего спуска в интегральной постановке обратной задачи гиперболического уравнения // Сиб. матем. журн. 2001. Т. 42. № 3. С.567–584.
6. *Тагиев Р.К.* Вариационный метод решения обратной задачи об определении коэффициентов эллиптических уравнений // Международная конференция «Обратные задачи теоритической и математической физики». Азербайджан, Сумгаит, Май 2003 г. С. 29–31.
7. *Искендеров А.Д.*, *Гамидов Р.А.* Оптимальная идентификация коэффициентов эллиптических уравнений // Автоматика и телемеханика. 2011. № 12. С. 144–155.
8. *Iskenderov A.D.*, *Tagiyev R.K.* Variational method solving the problem of identification of the coefficients of quasilinear parabolic problem // The 7th International Conference "Inverse Problems: modelling and Simulation" (IPMS – 2014). May 26 – 31, 2014. P. 31.
9. *Тагиев Р.К.*, *Касумов Р.А.* Об оптимизационной постановке коеффициентной обратной задачи для параболического уравнения с дополнительным интегральным условием // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2017. № 45. С. 49–59.
10. *Ладыженская О.А.*, *Уральцева Н.Н.* Линейные и квазилинейные уравнения эллиптического типа. М.: Наука, 1973. 576 с.
11. *Ладыженская О.А.*, *Солонников В.А.*, *Уральцева Н.Н.* Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. М.: Наука, 1967. 736 с.
12. *Тагиев Р.К.* Об оптимальном управлении коэффициентами эллиптических уравнений // Дифференц. уравнения. 2011. Т .47. № 6. С. 871–879.
13. *Tagiyev R.K.* Optimal control problems for elliptic equations with controls in coefficients // Trans. Nat. Acad. of Sci. of Azerb. Ser. Phys.-Techn. and Math. Sci. 2003. V. 23. No. 4. P. 251–260.
14. *Casado D.*, *Couce C.*, *Martin G.* Optimality conditions for nonconvex multistate control problems in the coefficients // SIAM. J. Control and Optimiz. 2004. V.43. No. 1. P. 216–239.
15. *Васильев Ф.П.* Методы решения экстремальных задач. М.: Наука, 1981. 400 с.

Статья поступила 17.05.2017 г.

Tagiev R.K, Kasymova R.S. (2017) COEFFICIENT INVERSE PROBLEM OF CONTROL TYPE FOR ELLIPTIC EQUATIONS WITH ADDITIONAL INTEGRAL CONDITION. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 48. pp. 17–29

DOI 10.17223/19988621/48/2

Let it be required to minimize the functional

$$J(\upsilon)=\int_0^1\left|u(0,x_2;\upsilon)-\int_0^1 H(x_1,x_2)u(x_1,x_2;\upsilon)dx_1\right|^2 dx_2$$

on solutions $u(x)=u(x\ ;\upsilon)=u(x_1,x_2;\upsilon)$ of the boundary-value problem

$$-\sum_{i=1}^{2}\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\upsilon(x_2)\frac{\partial u}{\partial x_i}\right)+q(x)u=f(x)\ ,\ x\in\Omega\ ,$$

$$-\upsilon(x_2)\frac{\partial u}{\partial x_1}=g(x)\ ,\ x\in\Gamma_{-1}\ ,$$

$$u(x;\upsilon)=0\ ,\ x\in\Gamma\backslash\Gamma_{-1}\ ,$$

corresponding to all admissible controls in the set

$$V=\left\{\upsilon=\upsilon(x_2)\in W_2^1(0,1):0<\nu\le\upsilon(x_2)\le\mu,|\upsilon'(x_2)|\le\mu_1\ п.в.на\,(0,1)\right\}.$$

where $\Omega=\{x=(x_1,x_2):0<x_i<1,\ i=1,2\}$, $\Gamma_{-1}=\{x=(0,x_2):0<x_2<1\}$, $H(x_1,x_2)$, $q(x)$, $f(x)$, $g(x)$ are given functions.

In this paper, we consider a coefficient inverse problem of the control type for an elliptic equation with a quality criterion corresponding to an additional integral condition. The questions of correctness of the formulation of the inverse problem of the control type are investigated. The Frechet differentiability of the quality criterion is proved and an expression for its gradient is found. A necessary optimality condition is established in the form of a variational inequality.

Keywords: Elliptic equation, Inverse problem, Integral condition.

TAGIEV Rafig Kalandar (Dr. Math. Sciences, prof. Baku State University, Azerbaijan)
E-mail: r.tagiyev@list.ru

KASIMOVA Rena Sattar gizih (Baku State University, Azerbaijan)
E-mail: rena.kasimova@list.ru

REFERENCES

1. Tikhonov A.N.(1963) *O reshenii nekorrektno postavlennykh zadach i metode regulyarizatsii* [On the solution of ill-posed problems and regularization method]. *Dokl. USSR Academy of Sciences*. 151 (3). pp. 501 – 504.
2. Iskenderov A.D. (1984) O variatsionnykh postanovkakh mnogomernykh obratnykh zadach matematicheskoy fiziki [On the variational formulations of multidimensional inverse problems of mathematical physics]. *Dokl. USSR Academy of Sciences*. 274 (3). pp. 531–533.
3. Alifanov O.A., Artyukhin E.A., Rumyantsev S.V.(1988) *Ekstremal'nye metody resheniya nekorrektnykh zadach* [Extreme methods of solving ill-posed problems]. Moscow: Nauka
4. Karchevsky A.L. (1997) Properties of the misfit functional for a nonlinear one-dimensional coefficient hyperbolic inverse problem. *J. Inverse Ill – Posed. Probl*. 5(2). pp. 139–165. DOI: 10.1515/jiip.1997.5.2.139.
5. Kabanikhin S.I., Iskakov K.T. (2001) Justification of the steepest descent method for the integral statement of an inverse problem for a hyperbolic equation. *Sib. Math. J.* 42(3). pp. 478–494. DOI: 10.1023/A:1010471125870.

6. Tagiev R.K. (2003) A Variational Method for Solving the Inverse Problem of Determining the Coefficients of Elliptic Equations. International Conference "Inverse Problems of Theoretical and Mathematical Physics" Azerbaijan. Sumgait. pp. 29–31.
7. Iskenderov A.D., Hamidov R.A. (2011) Optimal identification of coefficients of elliptic equations. *Automation and Remote Control*. 72(2). pp. 2553–2562.
8. Iskenderov A.D., Tagiyev R.K. (2014) Variational method solving the problem of the quasilinear parabolic problem. The 7th International Conference "Inverse Problems: modelling and Simulation" (IPMS-2014). P. 31.
9. Tagiyev R.K., Kasumov R.A. (2017) Ob optimizatsionnoy postanovke koeffitsientnoy obratnoy zadachi dlya parabolicheskogo uravneniya s dopolnitel'nym integral'nym usloviem [On the optimization formulation of a coefficient inverse problem for a parabolic equation with an additional integral condition]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 45. pp. 49 – 59. DOI: 10.17223/19988621/45/4.
10. Ladyzhenskaya O.A., Uraltseva N.N. (1973) *Lineynye i kvazilineynye uravneniya ellipticheskogo tipa* [Linear and quasilinear equations of the elliptic type]. Moscow: Nauka.
11. Ladyzhenskaya O.A., Solonnikov V.A., Uraltseva N.N. (1967) *Lineynye i kvazilineynye uravneniya parabolicheskogo tipa* [Linear and quasilinear equations of the parabolic type]. Moscow: Nauka.
12. Tagiyev R.K. (2011) On Optimal Control by Coefficients in an Elliptic Equations. *Diff. Equat.* 47(6). P. 877–886. DOI: 10.1134/S0012266111060139.
13. Tagiyev R.K. (2003) Optimal control problems for elliptic equations with controls in coefficients. *Trans. Nat. Acad. of Sci. of Azerb. Ser. Phys.-Techn. and Math. Sci.*, 23 (4), pp. 251–260.
14. Casado D., Couce C., Martin G.(2004) Optimality conditions for nonconvex multistate control problems in the coefficients. *SIAM. J. Control and Optimiz.*. 43(1). pp. 216–239. DOI: 10.1137/S0363012902411714.
15. Vasilyev F.P.(1981) *Metody resheniya ekstremal'nykh zadach* [Methods for solving extreme problems]. Moscow: Nauka.

УДК 514.8, 621.8
DOI 10.17223/19988621/48/3

Н.Р. Щербаков, А.А. Щёголева

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТЕЙ ЗУБЬЕВ КОНТАКТИРУЮЩИХ ДЕТАЛЕЙ ГИПОИДНОЙ ПЕРЕДАЧИ

Гипоидные передачи предназначены для передачи вращения между скрещивающимися валами и характеризуются повышенной нагрузочной способностью, плавностью хода и бесшумностью работы. Базовыми поверхностями такой передачи являются однополостные гиперболоиды вращения. В работе получены точные аналитические уравнения поверхности зуба входной детали *S*, а поверхность зуба выходной детали найдена как огибающая семейства поверхностей *S*.

Ключевые слова: *гипоидная передача*, *огибающая семейства поверхностей.*

Гипоидные передачи занимают важное место в большом многообразии зубчатых передаточных механизмов. Главная особенность гипоидной передачи – скрещивающиеся оси вращения базовых поверхностей – однополостных гиперболоидов вращения (*аксоидов*). Такое расположение осей позволяет обеспечить плавность хода, бесшумность работы и повышенную нагрузочную способность механизма (рис. 1).

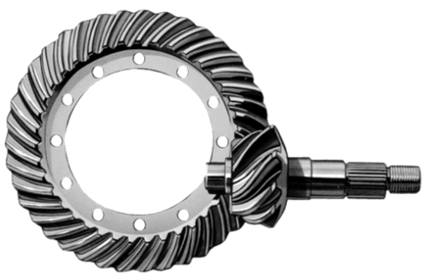


Рис. 1. Расположение шестерни (справа) и колеса (слева) гипоидной передачи
Fig. 1. Position of the gear (right) and wheel (left) of the hypoid gear

Авторами [1] для случая, когда вектора осей аксоидов перпендикулярны, получены условия касания таких гиперболоидов по прямолинейной образующей; доказано, что при заданных величинах смещения осей гиперболоидов и передаточного отношения параметры базовых поверхностей определяются однозначно. В данной статье приведены уравнения поверхностей зубьев входной и выходной деталей (*шестерни* и *колеса* соответственно) гипоидной передачи с перпендикулярными осями вращения этих деталей, причем поверхность зуба колеса получена как огибающая семейства поверхностей, образующегося при движении поверхности зуба шестерни во время работы механизма. Теория огибающих используется в теории механизмов и машин в основном при проектировании режущей части инструмента для обработки зубьев деталей [2]. Авторами [3] были получены уравнения поверхности зуба колеса как огибающей для гипоидной передачи с коническими аксоидами.

Уравнения поверхности зуба шестерни

Пусть ось колеса направлена по оси OZ, а ось шестерни параллельна оси OX и смещена в направлении оси OY на величину Sm. Тогда уравнение аксоида шестерни можно записать в виде

$$\frac{(y+Sm)^2+z^2}{a^2}-\frac{x^2}{c^2}=1,$$

где a – радиус горловой линии этого гиперболоида. Как доказано в [1], если аксоиды касаются по прямолинейной образующей, то a и c выражаются через Sm и передаточное отношение i:

$$a=\frac{i^2 Sm}{i^2+1},\ c=\frac{i\,Sm}{i^2+1}.$$

Для построения поверхности зуба шестерни запишем уравнение ее базового гиперболоида без смещения по оси OY:

$$\frac{y^2+z^2}{a^2}-\frac{x^2}{c^2}=1 \tag{1}$$

и рассмотрим сечение этого гиперболоида сферой некоторого радиуса R с центром в начале координат. Это сечение есть окружность, радиус которой ε, как показано в [1], равен

$$\varepsilon=a\sqrt{\frac{R^2+c^2}{a^2+c^2}}.$$

В [1] этот радиус обозначался r_1, а через r_2 был обозначен радиус окружности пересечения гиперболоида колеса со сферой. Отношение радиусов этих окружностей равно передаточному отношению

$$i=\frac{\varepsilon}{r_2}.$$

Поверхность зуба шестерни будем строить как семейство окружностей уменьшающихся радиусов следующим образом.

1. Наибольшая окружность сечения зуба имеет радиус ρ и лежит на сфере радиуса R, а центр этой окружности проектируется из центра сферы в точку окружности радиуса ε. Параметрические уравнения этой наибольшей окружности $\boldsymbol{okr}(\alpha)$ можно поручить поворотом вокруг оси OY на угол $\arcsin(\varepsilon/R)$ окружности радиуса ρ с центром на оси OX:

$$\boldsymbol{okr}(\alpha)=\begin{pmatrix}\dfrac{\sqrt{R^2-\varepsilon^2}}{R} & 0 & \dfrac{\varepsilon}{R}\\ 0 & 1 & 0\\ -\dfrac{\varepsilon}{R} & 0 & \dfrac{\sqrt{R^2-\varepsilon^2}}{R}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\sqrt{R^2-\rho^2}\\ \rho\cos\alpha\\ \rho\sin\alpha\end{pmatrix}$$

(здесь и далее параметрические уравнения кривых и поверхностей будем писать в виде вектор-функций одного или двух аргументов соответственно).

2. Поверхность зуба шестерни будем получать винтовым движением окружности $\boldsymbol{okr}(\alpha)$ вокруг оси OX с одновременным уменьшением радиуса этой окружности, при этом центры окружностей семейства должны лежать на гиперболоиде (1),

т.е. образовывать винтовую линию на этом гиперболоиде. Запишем параметрические уравнения гиперболоида (1):

$$\boldsymbol{Hb}(u,\upsilon)=\begin{pmatrix} c\,\mathrm{sh}\,u \\ a\,\mathrm{ch}\,u\cos\upsilon \\ a\,\mathrm{ch}\,u\sin\upsilon \end{pmatrix}. \tag{2}$$

Пусть размер шестерни по оси OX равен lr. Тогда, обозначая

$$f(\upsilon)=\mathrm{Arsh}\left(\frac{\sqrt{R^2-\varepsilon^2}}{c}\right)+\frac{z}{2\pi}\upsilon\left[\mathrm{Arsh}\left(\frac{\sqrt{R^2-\varepsilon^2}-lr}{c}\right)-\mathrm{Arsh}\left(\frac{\sqrt{R^2-\varepsilon^2}}{c}\right)\right],$$

где $\upsilon=0,..2\pi/z$ (z – число зубьев шестерни), lr – длина зуба шестерни (по оси OX), отрезок винтовой линии на поверхности (2) с длиной lr по оси OX можно записать в виде

$$\boldsymbol{Wint}(\upsilon)=\begin{pmatrix} c\,\mathrm{sh}(f(\upsilon)) \\ a\,\mathrm{ch}(f(\upsilon))\cos\upsilon \\ a\,\mathrm{ch}(f(\upsilon))\sin\upsilon \end{pmatrix}. \tag{3}$$

3. Из (3) видно, что при изменении параметра $\upsilon=0,...,2\pi/z$ точки винтовой линии будут лежать на окружностях уменьшающихся радиусов:

$$\varepsilon\upsilon(\upsilon)=a\,\mathrm{ch}(f(\upsilon)), \tag{4}$$

а эти окружности – на концентрических сферах, радиусы $R\upsilon(\upsilon)$ которых должны удовлетворять соотношению

$$c\,\mathrm{sh}(f(\upsilon))=\sqrt{R\upsilon(\upsilon)^2-\varepsilon\upsilon(\upsilon)^2},$$

из которого с учетом (4) получаем зависимость уменьшения радиуса сферы от изменения параметра υ:

$$R\upsilon(\upsilon)=\sqrt{c^2\mathrm{sh}^2(f(\upsilon))+a^2\mathrm{ch}^2(f(\upsilon))}. \tag{5}$$

Наконец, уменьшение окружности сечения зуба шестерни при изменении параметра υ запишем в виде

$$\rho\upsilon(\upsilon)=\frac{\rho}{\varepsilon}\varepsilon\upsilon(\upsilon). \tag{6}$$

Теперь можно записать уравнения поверхности зуба шестерни:

$$\boldsymbol{Sub}(\upsilon,\alpha)=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\upsilon & -\sin\upsilon \\ 0 & \sin\upsilon & \cos\upsilon \end{pmatrix}\times$$

$$\times\left[\left(\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{R\upsilon(\upsilon)^2-\varepsilon\upsilon(\upsilon)^2}}{R\upsilon(\upsilon)} & 0 & \frac{\varepsilon\upsilon(\upsilon)}{R\upsilon(\upsilon)} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\frac{\varepsilon\upsilon(\upsilon)}{R\upsilon(\upsilon)} & 0 & \frac{\sqrt{R\upsilon(\upsilon)^2-\varepsilon\upsilon(\upsilon)^2}}{R\upsilon(\upsilon)} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \sqrt{R\upsilon(\upsilon)^2-\rho\upsilon(\upsilon)^2} \\ \rho\upsilon(\upsilon)\cos\alpha \\ \rho\upsilon(\upsilon)\sin\alpha \end{pmatrix}\right)\right]. \tag{7}$$

Уравнения поверхности зуба колеса

Поверхность зуба колеса будем искать как огибающую семейства поверхностей (7). Это семейство образовано вращением поверхности (7) вокруг оси *OX* с одновременным поворотом вокруг оси *OZ* (после сдвига вдоль оси *OY* на величину *Sm*). Причем, если первый поворот происходит на угол τ, то второй – на угол –τ/*i*, где *i* – передаточное отношение. Параметрические уравнения описанного семейства поверхностей запишем в виде

$$\boldsymbol{Sem}(\tau,\upsilon,\alpha)=\begin{pmatrix}\cos(\tau/i) & -\sin(\tau/i) & 0\\ \sin(\tau/i) & \cos(\tau/i) & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\left[\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \cos\tau & \sin\tau\\ 0 & -\sin\tau & \cos\tau\end{pmatrix}\boldsymbol{Sub}(\upsilon,\alpha)-\begin{pmatrix}0\\ Sm\\ 0\end{pmatrix}\right]. \quad (8)$$

Согласно теории огибающих, требование наличия огибающей у семейства поверхностей приводит к условию понижения ранга матрицы якобиана функции, определяющей это семейство [4]. Для функции (8) это условие можно записать в виде обращения в нуль смешанного произведения частных производных векторфункции (8) по всем трем параметрам:

$$(\boldsymbol{Sem}'_\tau,\boldsymbol{Sem}'_\upsilon,\boldsymbol{Sem}'_\alpha)=0\,. \quad (9)$$

Обозначим через $\boldsymbol{Ws}$ двойное векторное произведение

$$\boldsymbol{Ws}=[[\boldsymbol{Sub}'_\alpha\times\boldsymbol{Sub}'_\upsilon]\times\boldsymbol{Sub}]$$

а через $\boldsymbol{Ns}$ – вектор нормали к поверхности зуба шестерни:

$$\boldsymbol{Ns}=\boldsymbol{Sub}'_\upsilon\times\boldsymbol{Sub}'_\alpha\,.$$

Тогда уравнение (9) можно переписать в виде

$$\boldsymbol{Ws}_2\cos\tau-\boldsymbol{Ws}_1\sin\tau-(i\,\boldsymbol{Ws}_0+Sm\,\boldsymbol{Ns}_0)=0\,, \quad (10)$$

где нижний индекс у вектор-функций означает соответствующую координату этой вектор-функции, т.е. коэффициенты этого уравнения являются скалярными функциями от параметров υ и α. Уравнение (10) является стандартным тригонометрическим уравнением, которое при условии

$$\left|\frac{i\,\boldsymbol{Ws}_0+Sm\,\boldsymbol{Ns}_0}{\sqrt{\boldsymbol{Ws}_1^{\,2}+\boldsymbol{Ws}_2^{\,2}}}\right|\le 1$$

имеет решение относительно τ, т.е. при этом условии из уравнения (10) можно выразить параметр τ через υ и α:

$$\tau=f(\upsilon,\alpha)$$

(явный вид *f*(υ, α) получается обычным образом с помощью введения вспомогательного угла $\varphi=\mathrm{arctg}(-\boldsymbol{Ws}_1/\boldsymbol{Ws}_2)$). Подставляя *f*(υ, α) в (8) вместо τ, получаем уравнение огибающей, т.е. уравнение поверхности зуба колеса. Уравнение характеристики [4], т.е. линии, по которой огибающая касается некоторой поверхности семейства $\boldsymbol{Sem}(C,\upsilon,\alpha)$, получится, если в уравнение огибающей подставить выражение υ через α из условия

$$f(\upsilon,\alpha)=C.$$

Эта задача решена численно для *C* = 0, в результате получена линия, по которой касаются поверхности зубьев деталей, изображенная на рис. 2.

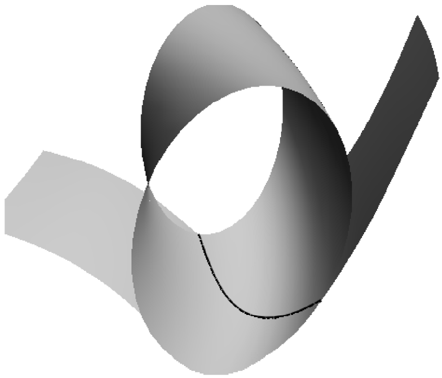


Рис. 2. Поверхности зубьев шестерни и колеса (огибающая) гипоидной передачи в контакте. Показана линия контакта (характеристика)
Fig. 2. Surfaces of gear and wheel teeth (envelope) of the hypoid gear in the contact. The curve is the line of contact (characteristic)

ЛИТЕРАТУРА

1. *Щербаков Н.Р.*, *Щеголева А.А.* Касание однополостных гиперболоидов вращения как аксоидов гипоидной передачи // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2017. № 47. С. 37–42.
2. *Люкшин В.С.* Теория огибающей семейства поверхностей (применительно к проектированию режущих инструментов). М., 1963. 267 с.
3. *Щербаков Н.Р.*, *Захаркин Н.В.* Геометрическое моделирование поверхности детали передаточного механизма как огибающей // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2012. № 4(20). С. 50–55
4. *Залгаллер В.А.* Теория огибающих. М.: Наука, 1975. 104 с.

Статья поступила 24.02.2017 г.

Shcherbakov N.R., Shchegoleva A.A. (2017) MODELING OF TEETH SURFACES OF CONTACTING DETAILS OF A HYPOID GEAR. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics.* 48. pp. 30–35

DOI 10.17223/19988621/48/3

Hypoid gears are intended for transmitting the rotation between skew shafts and are characterized by higher loading capacity, ease of movement, and operation quietness. Base surfaces (axoids) of such a gear are hyperboloids of revolution of one sheet. The surface of the tooth of the input component S is obtained by helical motion of a circumference around the detail axis of rotation with a simultaneous decrease in the radius of this circumference; at the same time, centers of circumferences of the family must lie on the axoid of the input component, i.e., form a helical line on this hyperboloid. In this work, exact analytical equations of the surface S are obtained and the input component tooth surface is found as an envelope of the family of surfaces S. This family is formed by rotations of the surface S around the axis of rotation of the input detail with a simultaneous rotation around the axis of the output detail (after a shift to the distance between the axes). The first and second rotations are performed at angles τ and $-\tau/i$, respectively, where i is the gearing ratio. Parametric equations of the tooth contact line as a regular curve along which the envelope is tangential to the surface of the family (the characteristic) are obtained.

Keywords: *hypoid gear*, *envelope of a family of surfaces.*

SHCHERBAKOV Nikolay Romanovich (Doctor of Physics and Mathematics,
Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation).
E-mail: nrs@math.tsu.ru

SHCHEGOLEVA Anastasija Andreevna (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation).
E-mail: nschegoleva@sibmail.com

REFERENCES

1. Shcherbakov N.R., Shchegoleva A.A. (2017) Kasanie odnopolostnych giperboloidov vrachenija kak acsoidov gipoidnoj peredachi [Tangency of one-sheeted hyperboloids as axsoids of the hypoid gearing]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mechanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 47. pp. 37–42.
2. Ljukchin W.S.(1963) *Teorija ogibajushej semejistwa poverchnosteji*. Moscow.
3. Shcherbakov N.R., Zakharkin N.V. (2012) Geometricheskoe modelirovanie detail peredatochnogo mechanism kak ogibajusheji [Geometrical simulation oft the surface of the detail oft he driving gear as envelope]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mechanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 4(20). pp. 50–55.
4. Zalgaller W.A. (1975) *Teorija ogibajushich* [Envelope theory]. Moscow: Nauka.

ВЕСТНИК ТОМСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА
2017 Математика и механика № 48

МЕХАНИКА

УДК 532.542
DOI 10.17223/19988621/48/4

Е.И. Борзенко, К.Е. Рыльцева, О.Ю. Фролов, Г.Р. Шрагер

РАСЧЕТ КОЭФФИЦИЕНТА МЕСТНОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ ДЛЯ ТЕЧЕНИЯ ВЯЗКОЙ НЕСЖИМАЕМОЙ ЖИДКОСТИ В ТРУБЕ С ВНЕЗАПНЫМ СУЖЕНИЕМ[1]

Построена математическая модель течения вязкой несжимаемой жидкости в трубе с внезапным сужением. Выполнено численное решение задачи с помощью конечно-разностного метода на основе схемы продольно-поперечной прогонки. Восстановлена картина течения в виде распределения линий тока вдоль трубы, определены кинематические характеристики потока и их зависимости от основных параметров задачи. Проведены параметрические исследования, которые позволили получить зависимости значений коэффициента местного сопротивления при изменении числа Рейнольдса и степени сужения поперечного сечения трубы.

Ключевые слова: *вязкая несжимаемая жидкость*, *внезапное сужение*, *стационарное течение*, *метод установления*, *коэффициент местного сопротивления*, *число Рейнольдса*, *метод прогонки.*

Оборудование для транспортировки жидких сред, например трубопроводы, реакторы, биомедицинские установки, экструдеры, как правило, включает в себя различные конструктивные элементы, в том числе скачок сечения в виде резкого уменьшения диаметра трубы (сужение), в которой реализуется течение. При конструировании перечисленных технических устройств с элементами резкого сужения требуются результаты экспериментальных и численных исследований течения в трубе с внезапным сужением. Это связано с тем, что изменения геометрии трубы оказывают непосредственное влияние на характер потока и его кинематические и динамические свойства, которые необходимо учитывать с целью обеспечения требуемого режима и условий течения.

Экспериментальные данные о течении вязкой несжимаемой жидкости в трубе с внезапным сужением, опубликованные в ранних работах, были получены на основе визуализации процесса и демонстрировали лишь качественные характеристики потока. В обзорных работах [1, 2] отмечается разобщенность этих результатов и возникающие затруднения в выборе достоверных данных. С развитием технологий и усовершенствованием измерительной техники появилась возможность детально описать картину течения в трубе с сужением. В [3] содержатся результаты, полученные при использовании лазерного допплеровского анемометра в качестве измерительного прибора скорости течения. Найденное распределение скоро-

[1] Работа выполнена при поддержке гранта Президента МК-710.2017.1 и гранта РФФИ №15-08-03935.

стей позволило изобразить картину ламинарного течения в трубе с сужением. На основании проведенных исследований было выявлено, что при относительно небольших значениях числа Рейнольдса течение является устойчивым и симметричным относительно оси симметрии. Циркуляционные зоны, образующиеся за скачком сечения сверху и снизу относительно оси трубы, имеют одинаковый размер, который увеличивается с ростом значения параметра Рейнольдса. Однако при больших числах Рейнольдса размеры циркуляционных зон уже не будут совпадать. Дальнейшее увеличение параметра приводит к появлению дополнительных циркуляционных зон.

Характерные особенности двумерного течения в трубе с внезапным сужением были определены экспериментально и описаны в [4–6].

Для численного решения задач о течении жидкости в трубах с различными степенями сужения в широком диапазоне чисел Рейнольдса используются методы конечных разностей и конечных объемов [7, 8]. Статья [9] содержит краткое описание новых подходов для согласования экспериментальных и численных результатов для течения вязкой жидкости через сужение трубы.

Результаты исследования местных потерь давления в трубе с сужением в зависимости от числа Рейнольдса опубликованы в [10, 11]. Рассматривались ламинарные течения как ньютоновской, так и неньютоновской жидкостей для чисел Рейнольдса от 20 до 2000. В [12] автор констатирует, что ламинарное течение ньютоновской жидкости в трубе с сужением является «решенной задачей». Однако это утверждение опровергается в [13] со ссылкой на противоречивость имеющихся на тот момент результатов расчетов местных потерь давления. Обобщенные данные, представленные в обзорной статье [14], подтверждают тот факт, что эта проблема нуждается в дополнительных исследованиях.

Расхождения в значениях полученных коэффициентов сопротивления в представленных работах могут объясняться различными методами их определения, а также выбором сечений вверх и вниз по потоку от сужения, начиная с которых течение считается установившимся. Например, в [14] расположение датчиков давления оставалось постоянным для экспериментов с различными жидкостями, несмотря на то, что характер течения и длины зон двумерного течения в каждом рассматриваемом случае различны. В ходе эксперимента не всегда удается точно выполнить степень сужения, поэтому заявленное авторами значение может содержать значительную ошибку. Погрешности вносят также шероховатости внутренних стенок, нарушение соосности труб разного диаметра.

В [14] представлены результаты экспериментальных и численных исследований течений в трубах с различными степенями сужения: 0.22, 0.5, 0.85. В качестве ньютоновской жидкости в эксперименте использовался водный раствор глицерина различной концентрации. Были получены графические зависимости коэффициента местного сопротивления от параметра Рейнольдса для ламинарного и турбулентного режимов течения. В работе приведен обширный литературный обзор по рассматриваемой проблеме и представлен сравнительный анализ результатов разных исследователей. Несмотря на частичное совпадение полученных данных с данными других авторов численных и экспериментальных работ в некоторых диапазонах чисел Рейнольдса, были выявлены существенные расхождения значений местного гидравлического сопротивления. В частности, результаты численных расчетов автора и значения коэффициента, полученные в ходе эксперимента, между собой не совпадают. Были предприняты попытки объяснить подобные расхождения, но без достаточного обоснования.

Целью данной работы является исследование кинематических характеристик и потерь давления для течения вязкой несжимаемой жидкости в цилиндрической трубе с внезапным сужением в зависимости от параметра Рейнольдса и степени сужения трубы.

Постановка задачи

В работе исследуется ламинарное стационарное течение вязкой несжимаемой жидкости в цилиндрической трубе с внезапным сужением. Задача формулируется в осесимметричной постановке. Область решения схематично изображена на рис. 1.

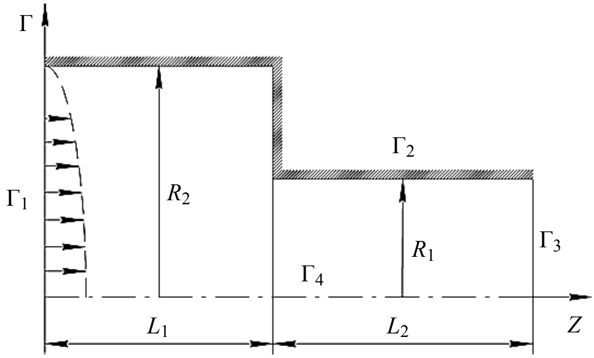


Рис. 1. Область течения
Fig. 1. Flow region

Математическая модель рассматриваемого течения включает в себя следующие безразмерные уравнения, записанные в цилиндрической системе координат в переменных функция тока – вихрь

$$\frac{\partial(v\omega)}{\partial r}+\frac{\partial(u\omega)}{\partial z}=\frac{2}{\mathrm{Re}}\left(\nabla^2\omega-\frac{\omega}{r^2}\right),\quad \frac{\partial(v\omega)}{\partial r}+\frac{\partial(u\omega)}{\partial z}=\frac{2}{\mathrm{Re}}\left(\nabla^2\omega-\frac{\omega}{r^2}\right),$$

$$\nabla^2\psi-\frac{2}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r}=-r\omega,$$

где функция тока и вихрь определяются из уравнений [15]

$$v=-\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial z},\quad u=\frac{1}{r}\frac{\partial\psi}{\partial r},\quad \omega=\frac{\partial v}{\partial z}-\frac{\partial u}{\partial r}.$$

Здесь v, u – радиальная и аксиальная компоненты скорости соответственно, $\mathrm{Re}=\rho UD/\mu$ – число Рейнольдса, ρ – плотность, $D=2R_1$ – диаметр узкой части трубы, U – среднерасходная скорость в узкой части трубы, μ – динамическая вязкость жидкости. В качестве масштабов обезразмеривания были приняты следующие величины: длины – радиус узкой части трубы R_1; скорости – среднерасходная скорость в узкой части трубы U; давления – величина $\rho U^2/2$.

В рассматриваемой задаче вязкая несжимаемая жидкость подается в трубу через входное сечение Γ_1 с постоянным расходом, профиль скорости при этом соответствует течению Пуазейля. На твердой неподвижной стенке Γ_2 реализуются условия прилипания, на оси симметрии трубы $Г_4$ выполняются условия симметрии. На выходе $Г_3$ используются мягкие граничные условия. Входная и выходная границы расположены на достаточном удалении от скачка сечения ($L_1/R_1 = 12$, $L_2/R_1 = 12$), чтобы исключить влияние последнего на характер течения в окрестности сечений $Г_1$ и $Г_3$. Степень сужения трубы обозначается $\beta = R_2/R_1$ (рис. 1). Граничные условия имеют следующий вид:

$$\Gamma_1 : \psi = r^2 - \frac{r^4}{2}, \quad \omega = 4r, \quad z = 0, \quad 0 \le r \le \beta;$$

$$\Gamma_2 : \psi = \frac{1}{2}, \quad \omega = -\frac{1}{\beta}\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}, \quad r = \beta, \quad 0 \le z \le L_1,$$

$$\psi = \frac{1}{2}, \quad \omega = -\frac{1}{r}\frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}, \quad 1 \le r \le \beta, \quad z = L_1,$$

$$\psi = \frac{1}{2}, \quad \omega = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}, \quad r = 1, \quad L_1 \le z \le L_1 + L_2;$$

$$\Gamma_3 : \frac{\partial \psi}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial \omega}{\partial z} = 0, \quad z = L_1 + L_2;$$

$$\Gamma_4 : \psi = 0, \quad \omega = 0, \quad r = 0.$$

Метод решения

В ходе решения сформулированной задачи используется метод установления, в результате применения которого стационарная задача преобразуется в нестационарную и процесс сводится к пошаговому приближению решения нестационарной задачи к решению исходной стационарной задачи [16]. Численное решение основных уравнений осуществляется конечно-разностным методом на основе схемы продольно-поперечной прогонки [17]. В соответствии с алгоритмом его реализации на область решения наносится равномерная расчетная сетка, исходные дифференциальные уравнения записываются в виде разностных аналогов на промежуточном и целом шагах по времени. Система полученных алгебраических уравнений решается методом прогонки.

С целью верификации численного алгоритма выполнена серия тестовых расчетов для проверки аппроксимационной сходимости. На рис. 2 изображены профили аксиальной скорости в сечении, проходящем в окрестности скачка при различных значениях шага сетки (h).

В табл. 1 представлены значения аксиальной скорости на оси симметрии в выходном сечении трубы в зависимости от шага сетки и величина ошибки относительно значений скорости профиля Пуазейля. Результаты на рис. 2 и в табл. 1 демонстрируют аппроксимационную сходимость алгоритма.

Таблица 1

h	$u_{вых}$	δ, %
0.1	1.9926	0.37
0.05	1.9988	0.06
0.025	2.0004	0.02
0.0125	2.0002	0.01

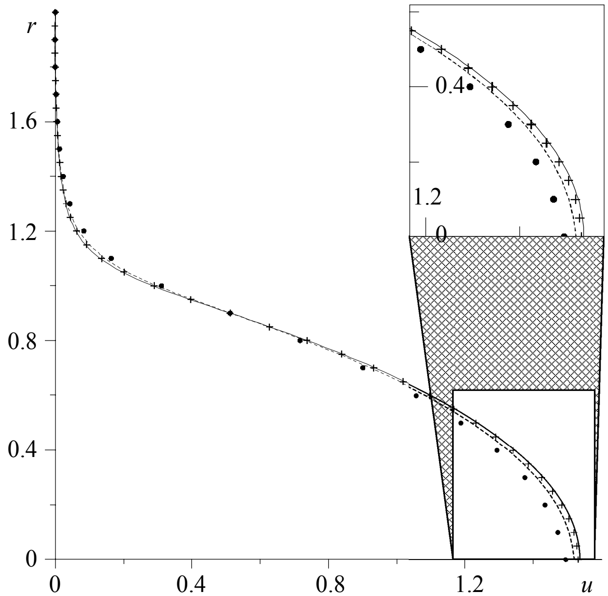


Рис. 2. Распределение аксиальной скорости в сечении z = 11.8 (Re = 1, β = 2). Обозначения: ••• – h = 0.1, - - - – h = 0.05, + + + – h = 0.025, —— – h = 0.0125
Fig. 2. Distribution of an axial velocity in cross section z = 11.8 (Re = 1, β = 2). Notations: ••• – h = 0.1, - - - – h = 0.05, + + + – h = 0.025, —— – h = 0.0125

Местное гидравлическое сопротивление

Течение вязкой жидкости в трубе с внезапным сужением характеризуется двумя видами потерь полного давления: потерей на трение $\Delta P_{\text{тр}}$; местными потерями $\Delta P_{\text{м}}$, которые возникают в окрестности скачка сечения. Оба вида потерь учитываются при расчете перепада полного давления между входным и выходным сечениями трубы согласно следующему выражению:

$$P_1 - P_2 = \Delta P = \Delta P_{\text{тр}} + \Delta P_{\text{м}} .$$

Потерянное на участке полное давление, отнесенное к динамическому напору, дает так называемый коэффициент гидравлического сопротивления [18]

$$C = \frac{\Delta P}{0.5\rho U^2} = \frac{\Delta P_{\text{тр}} + \Delta P_E}{0.5\rho U^2} = C_{\text{тр}} + C_{\text{м}} .$$

Здесь $C_{\text{тр}}$ – коэффициент сопротивления, $C_{\text{м}}$ – коэффициент местного сопротивления.

Местные потери гидродинамического давления $\Delta P_{\text{м}}$ определяются как изменение давления в переходной области в предположении постоянства падения давления на трение установившегося одномерного течения во входной и выходной частях трубы. Применяя уравнение Бернулли к сечениям, расположенным вверх и вниз по течению от сужения, получаем выражение для коэффициента местного гидродинамического сопротивления

$$C_{\text{м}} = \frac{\Delta P_{\text{м}}}{0.5\rho U^2} + \alpha(1-\beta^4) , \tag{1}$$

где α – коэффициент коррекции кинетической энергии, вводимый для учета неоднородности профиля скорости. Для профиля Пуазейля $\alpha = 2$. Коэффициент местного сопротивления определяется потерями энергии, связанными с перестройкой потока в окрестности скачка сечения.

Записанная формула для расчета коэффициента местного сопротивления – не единственный способ получения его значения. Если представить гидравлическое сопротивление в виде отношения потерянной на участке между входом и выходом энергии (мощности) к кинетической энергии (мощности) во входном сечении, то формула для определения местного сопротивления примет вид [18]

$$C_{\text{м}} = \frac{\Delta N}{(1/2)\rho F U^3}, \qquad (2)$$

где F – площадь входного сечения трубы, ΔN – мощность, теряемая на данном участке и характеризующая величину механической энергии, превращаемой в теплоту за единицу времени [19].

Результаты

На основе данных, полученных в ходе численного решения задачи, восстановлена картина течения в виде распределения линий тока вдоль трубы (рис. 3). Структура потока включает зоны одномерного течения в узкой и широкой частях трубы на достаточном удалении от сужения. В окрестности скачка формируется зона двумерного течения, включающая в себя циркуляционную зону в области внутреннего угла.

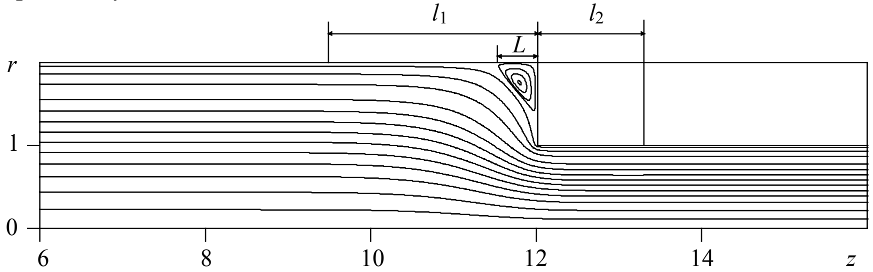


Рис. 3. Картина течения (Re = 1, $\beta = 2$)
Fig. 3. Flow pattern (Re = 1, $\beta = 2$)

На основании картины течения для количественного анализа вводятся следующие безразмерные геометрические характеристики составляющих структуры потока: длина циркуляционной зоны L, длины участков двумерного течения до и после скачка сечения – l_1 и l_2 соответственно (рис. 3). Значения l_1 и l_2 определяются как расстояния от уступа до поперечных сечений, в которых абсолютное отклонение максимальной радиальной скорости от нуля меньше, чем 10^{-3} вниз и вверх по потоку соответственно.

На рис. 4 приведены результаты расчетов в виде зависимостей введенных характеристик от числа Рейнольдса и коэффициента сужения трубы (рис. 4). Наблюдаются следующие тенденции:

- с увеличением Re L и l_1 уменьшаются, а l_2 увеличивается;

- с ростом β происходит увеличение L и l_1, при этом изменение l_2 незначительно, поскольку при различных степенях сужения трубы характер течения в узкой части меняется слабо.

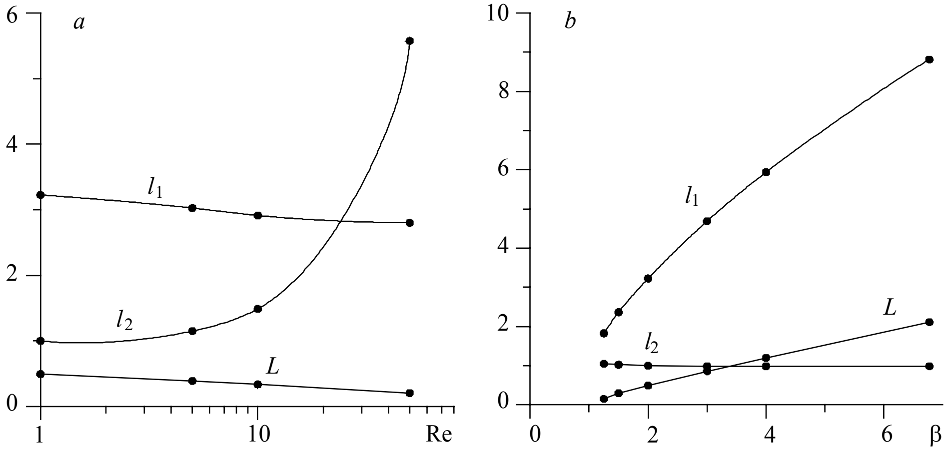


Рис. 4. Зависимости геометрических характеристик структуры потока от определяющих параметров: (*a*) β = 2; (*b*) Re = 1

Fig. 4. Dependency diagram of the flow geometrical characteristics upon the main parameters: (*a*) β = 2 and (*b*) Re = 1

Значения длины циркуляционной зоны, полученные в ходе экспериментальных и численных исследований течения в трубе с сужением, приведены в [20–22]. Данные в [20, 21] получены экспериментально с β = 2.26 и β = 4 соответственно, численные результаты представлены [22]. На рис. 5 демонстрируется качественное совпадение результатов расчетов в зависимости от числа Рейнольдса с экспериментальными и численными данными [20–22].

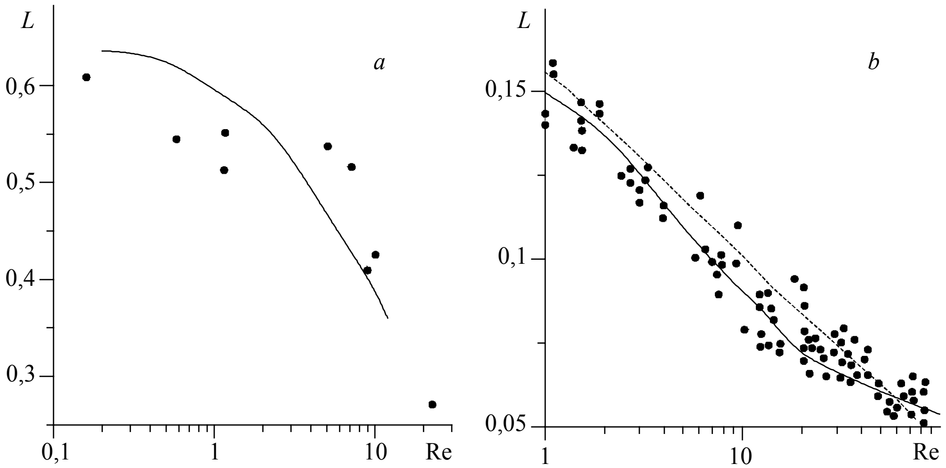


Рис. 5. Сравнение зависимостей длины циркуляционной зоны от числа Рейнольдса: (*a*) β = 2.26: ••• – данные из [20], —— – расчеты данной работы; (*b*) β = 4: ••• – данные из [21], - - - – расчеты из [22], —— – расчеты данной работы

Fig. 5. Comparison of dependency diagrams of the circulation zone length upon Reynolds number: (*a*) β = 2.26: ••• – data from [20], —— – calculations in the current work; (*b*) β = 4: ••• – data from [21], - - - – calculations from [22], —— – calculations in the current work

Многие авторы экспериментальных и теоретических работ по изучению течения жидкости в трубе со скачком сечения приводят аппроксимационные зависимости длины зоны двумерного течения за скачком сечения (l_2) от числа Рейнольдса [2, 23–27]. В этих статьях в качестве длины зоны двумерного течения за скачком принимается расстояние от места сужения до сечения, в котором скорость на оси симметрии достигает 98–99 % от значения скорости установившегося течения. Сравнение результатов расчетов, полученных при использовании указанного критерия, и данных из перечисленных источников приведено на рис. 6. Наблюдается удовлетворительное согласование результатов.

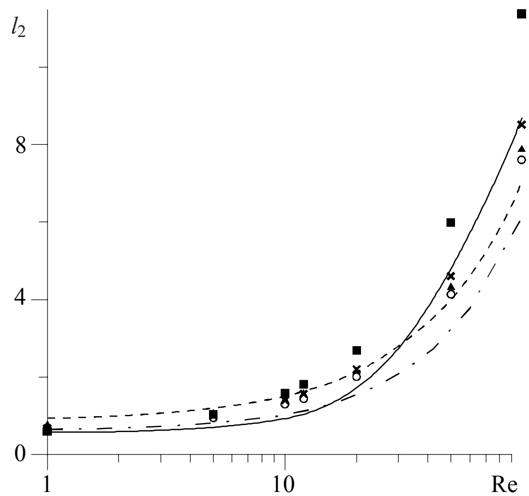


Рис. 6. Сравнение зависимостей l_2(Re) при $\beta = 4$. Обозначения: ○○○ – данные из [2], –•–•– – данные из [23], ▲▲▲– данные из [24], **x x x** – данные из [25], ■ ■ ■ – данные из [26], - - - – данные из [27], —— – расчеты данной работы

Fig. 6. Comparison of dependency diagrams l_2(Re) at $\beta = 4$. Notations: ○○○ – data from [2], –•–•– – data from [23], ▲▲▲– data from [24], x x x – data from [25], ■ ■ ■ – data from [26], - - - – data from [27], —— – calculations in the current work

Результаты расчетов значений коэффициента местного сопротивления по двум изложенным формулам (1), (2) представлены в табл. 2. Максимальное расхождение в значениях не превышает 5%.

Таблица 2

Re	1	5	10	20	50	99
$C_м(1)$	17.505	3.609	1.929	1.127	0.665	0.489
$C_м(2)$	17.847	3.671	1.953	1.126	0.641	0.466

В формуле (2) для расчета мощности используются процедуры численного дифференцирования и интегрирования, которые приводят к дополнительным погрешностям, поэтому все дальнейшие расчеты выполнялись по формуле (1).

На рис. 7 представлены зависимости местного коэффициента сопротивления от числа Рейнольдса и степени сужения трубы. С ростом Re значения $C_м$ уменьшаются, что объясняется сокращением длины зоны двумерного течения перед скачком сечения. Увеличение коэффициента $C_м$ при увеличении β связано с ростом размеров циркуляционной зоны. При этом, по-видимому, можно ожидать установления коэффициента местного сопротивления при достаточно больших степенях сужения трубы.

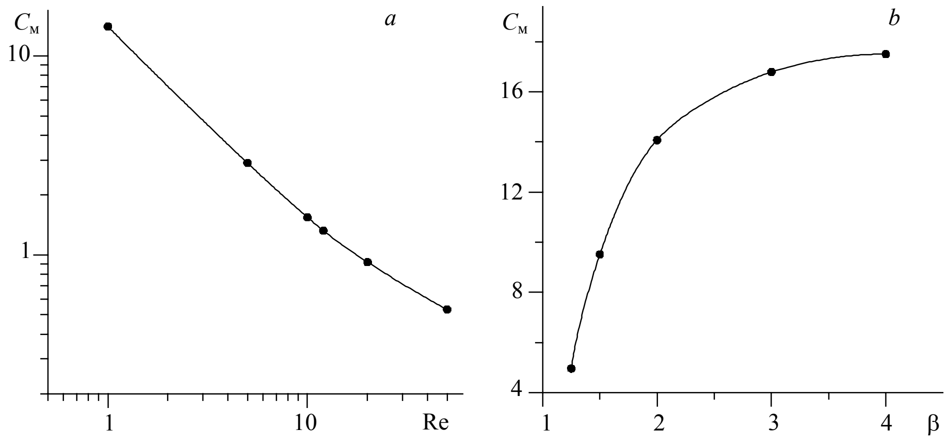


Рис. 7. Зависимости коэффициента местного сопротивления от определяющих параметров: (*a*) β = 2; (*b*) Re = 1
Fig. 7. Dependency diagrams of the local resistance coefficient upon the main parameters: (*a*) β = 2 and (*b*) Re = 1

Для сравнения полученных результатов была выбрана работа [14], в которой автор представил данные численных расчетов коэффициента местного сопротивления (рис. 8).

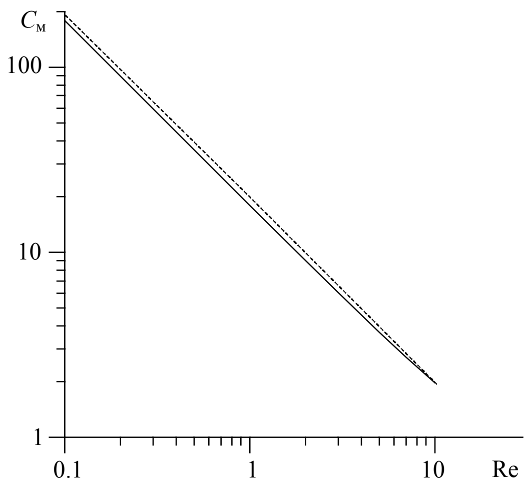


Рис. 8. Сравнение зависимостей коэффициента местного сопротивления от числа Рейнольдса при β = 4.558: - - - – расчеты из [14], —— – расчеты данной работы
Fig. 8. Comparison of dependency diagrams of the local resistance coefficient upon Reynolds number at β = 4.558: - - - – calculations from [14], —— – calculations in the current work

Из рисунка видно, что результаты численных расчетов коэффициента местного сопротивления практически совпадают.

Заключение

В результате проделанной работы выполнено математическое моделирование течения ньютоновской жидкости в трубе с внезапным сужением. Реализовано численное решение сформулированной задачи. Проведены параметрические исследования кинематических характеристик потока в зависимости от числа Рейнольдса в диапазоне изменения от 1 до 99 и степени сужения трубы: от 1.25 до 4. Рассчитаны значения коэффициента местного сопротивления и выявлены тенденции их изменения при варьировании основных параметров задачи.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Fan C.T.*, *Hwang C.L.* Bibliography of hydrodynamic entrance region flow // Kansas State University Bulletin. 1966. V. 50(3).
2. *Boger D.V.* Circular entry flows of inelastic and viscoelastic fluids // Advances in Transport Processes. 1982. V. 2. P. 43–104.
3. *Durst F.*, *Loy T.* Investigations of laminar flow in a pipe with sudden contraction of cross sectional area // Computers & Fluids. 1985. V. 13(1). P. 15–36.
4. *White S.A.*, *Baird D.G.* The importance of extensional flow properties on planar entry flow patterns of polymer melts // J. Non-Newtonian Fluid Mechanics. 1986. V. 20. P. 93–101.
5. *Evans R.E.*, *Walters K.* Further remarks on the lip-vortex mechanism of vortex enhancement in planar-contraction flows // J. Non-Newtonian Fluid Mechanics. 1989. V. 32. P. 95–105.
6. *Rothstein J.P.*, *McKinley G.H.* The axisymmetric contraction-expansion: the role of extensional rheology on vortex growth dynamics and the enhanced pressure drop // J. Non-Newtonian Fluid Mechanics. 2001. V. 98. P. 33–63.
7. *White S.A.*, *Baird D.G.* Numerical simulation studies of the planar entry flow of polymer melts // Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics. 1988. V. 30. P. 47–71.
8. *Mompean G.*, *Deville M.* Unsteady finite volume simulation of Oldroyd-B fluid through a three-dimensional planar contraction // J. Non-Newtonian Fluid Mechanics. 1997. V. 72. P. 253–279.
9. *Walters K.*, *Webster M.F.* The distinctive CDF challenges of computational rheology // Int. J. Numerical Methods in Fluids. 2003. V. 43. P. 577–596.
10. *Astarita G.*, *Greco G.* Excess pressure drop in laminar flow through sudden contraction // Ind. Eng. Chem. Fundamentals. 1968. V. 7(1). P. 27–31.
11. *Sylvester N.D.*, *Rosen S.L.* Laminar flow in the entrance region of a cylindrical tube // AICHE Journal. 1970. V. 16(6). P. 964–966.
12. *Boger D.V.* Viscoelastic flows through contractions // Annual Reviews. Fluid Mechanics. 1987. V. 19. P. 157–182.
13. *Sisavath S.*, *Jing X.*, *Pain C.C.*, *Zimmerman R.W.* Creeping flow through axisymmetric sudden contraction or expansion // J. Fluids Eng. (Trans. ASME). 2002. V. 124(1). P. 273–278.
14. *Pienaar V.G.* Viscous flow through sudden contractions / Dis. Cape Peninsula University of Technology, 2004. 198 p.
15. *Роуч П.* Вычислительная гидродинамика / пер. с англ.: В.А. Гущина, В.Я. Митницкого; под ред. П.И. Чушкина. М.: Мир, 1980. 616 с.
16. *Годунов С.К.*, *Рябенький В.С.* Введение в теорию разностных схем. М.: Физматгиз, 1962. 340 с.
17. *Яненко Н.Н.* Метод дробных шагов решения многомерных задач математической физики. Новосибирск: Наука, 1967. 197 с.
18. *Идельчик И.Е.* Справочник по гидравлическим сопротивлениям / под ред. М.О. Штейнберга. 3-е. изд. М.: Машиностроение, 1992. 672 с.

19. *Кочин Н.Е.*, *Кибель И.А.*, *Розе Н.В.* Теоретическая гидромеханика, ч. 2, изд. 4-е. М.: Физматлит, 1963. 728 с.
20. *Monnet P.*, *Menard C.*, *Sigli D.* Some new aspects of the slow flow of a viscous fluid through an axisymmetric duct expansion or contraction. II – Experimental part // Appl. Sci. Res. 1982. V. 39. P. 233–248.
21. *Boger D.*, *Hur D.*, *Binnington R.* Further observations of elastic effects in tubular entry flows // Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics. 1986. V. 20. P. 31–49.
22. *Kim-E M.E.*, *Brown R.A.*, *Armstrong R.C.* The roles of inertia and shear-thinning in flow of an inelastic liquid through an axisymmetric sudden contraction // J. Non-Newtonian Fluid Mech. 1983. V. 13. P. 341–363.
23. *Ajayi K.T.*, *Papadopoulos G.*, *Durst F.* Influence of upstream development on the losses incurred by flow past an axisymmetric sudden contraction // American Institute of Aeronautics and Astronautics AIAA-98-0794. 1998.
24. *Christiansen E.B.*, *Kelsey S.J.*, *Carter T.R.* Laminar tube flow through an abrupt contraction // AlChE Journal. 1972. V. 18(2). P. 372–380.
25. *Perry R.H.*, *Green D.W.*, *Maloney J.O.* Perry's chemical engineers' handbook. 7th ed.: McGraw-Hill, 1997.
26. *Vrentas*, *J.S.*, *Duda*, *J.L.* Flow of a Newtonian fluid through a sudden contraction // Appl. Sci. Res. 1973. V. 28. P. 241–260.
27. *Binding D.M.* An approximate analysis for contraction and converging flows // Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics. 1988. V. 27(2). P. 173–189.

Статья поступила 10.07.2017 г.

Borzenko E.I, Ryltseva K.E., Frolov O.Yu, Shrager G.R. (2017) CALCULATION OF THE LOCAL RESISTANCE COEFFICIENT OF VISCOUS INCOMBRESSIBLE FLUID FLOW IN A PIPE WITH SUDDEN CONTRACTION. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 48. pp. 36–48

DOI 10.17223/19988621/48/4

Most technical applications for fluid transportation include such a structural particularity as sudden contraction. This geometrical feature has an effect on the flow characteristics that should be taken into account in order to provide the appropriate mode and conditions of the flow.

This work was intended to investigate the kinematic characteristics and pressure losses of Newtonian fluid flow through an axisymmetric sudden contraction. The mathematical statement of the problem of laminar flow was formulated using stream function and vorticity variables. The stationary solution was obtained using the relaxation method with the following realization of numerical algorithm based on the finite difference alternative directions scheme. The obtained flow pattern showed that the flow structure apart from the one-dimensional zones included two-dimensional regions in the vicinity of contracted part (l_1 and l_2 are the lengths of two-dimensional regions upstream and downstream of the sudden contraction, respectively; L is the length of recirculation zone in the inner corner). The effect of the main parameters on these characteristics was studied and represented as dependency diagrams.

For the calculations of local resistance coefficient ($C_м$), two different formulas were used. Implemented parametrical investigations allowed plotting the local resistance coefficient as a function of the Reynolds number and pipe contraction ratio: $C_м$ decreased with an increase in the Reynolds number; an increase in contraction ratio caused an increase in $C_м$. The obtained results were verified and compared with available data.

Keywords: viscous incompressible fluid, sudden contraction, stationary flow, relaxation method, local resistance coefficient, Reynolds number, sweep method.

BORZENKO Evgeniy Ivanovich (Candidate of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation)
E-mail: borzenko@ftf.tsu.ru

RYLTSEVA Kira Evgen'evna (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation)
E-mail: kiraworkst@gmail.com

FROLOV Oleg Yur'evich (Candidate of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation)
E-mail: frolov@ftf.tsu.ru

SHRAGER Gennady Rafailovich (Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation)
E-mail: shg@ftf.tsu.ru

REFERENCES

1. Fan C.T., Hwang C.L. (1966) Bibliography of hydrodynamic entrance region flow. *Kansas State University Bulletin*. 50(3).
2. Boger D.V. (1982) Circular entry flows of inelastic and viscoelastic fluids. *Advances in Transport Processes*. 2. pp. 43–104.
3. Durst F., Loy T. (1985) Investigations of laminar flow in a pipe with sudden contraction of cross sectional area. *Computers & Fluids*. 13(1). pp. 15–36. DOI: 10.1016/0045-7930(85) 90030-1.
4. White S.A., Baird D.G. (1986) The importance of extensional flow properties on planar entry flow patterns of polymer melts. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. 20. pp. 93–101. DOI: 10.1016/0377-0257(86)80016-7.
5. Evans R.E., Walters K. (1989) Further remarks on the lip-vortex mechanism of vortex enhancement in planar-contraction flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. 32. pp. 95–105. DOI: 10.1016/0377-0257(89)85043-8.
6. Rothstein J.P., McKinley G.H. (2001) The axisymmetric contraction-expansion: the role of extensional rheology on vortex growth dynamics and the enhanced pressure drop. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. 98. pp. 33–63. DOI: 10.1016/S0377-0257(01)00094-5.
7. White S.A., Baird D.G. (1988) Numerical simulation studies of the planar entry flow of polymer melts. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. 30. pp. 47–71. DOI: 10.1016/ 0377-0257(88)80017-X.
8. Mompean G., Deville M. (1997) Unsteady finite volume simulation of Oldroyd-B fluid through a three-dimensional planar contraction. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. 72. pp. 253–279. DOI: 10.1016/S0377-0257(97)00033-5.
9. Walters K., Webster M.F. (2003) The distinctive CDF challenges of computational rheology. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 43. pp. 577–596. DOI: 10.1002/ fld.522.
10. Astarita G., Greco G. (1968) Excess pressure drop in laminar flow through sudden contraction. *Ind. Eng. Chem. Fundamentals*. 7(1). pp. 27–31. DOI: 10.1021/i160025a005.
11. Sylvester N.D., Rosen S.L. (1970) Laminar flow in the entrance region of a cylindrical tube. *AICHE Journal*. 16(6). pp. 964–966. DOI: 10.1002/aic.690160617.
12. Boger D.V. (1987) Viscoelastic flows through contractions. *Annual Reviews. Fluid Mechanics*. 19. pp. 157–182. DOI: 10.1146/annurev.fl.19.010187.001105.
13. Sisavath S., Jing X., Pain C.C., Zimmerman R.W. (2002) Creeping flow through axisymmetric sudden contraction or expansion. *J. Fluids Eng.* (*Trans. ASME*). 124(1). pp. 273–278. DOI:10.1115/1.1430669.
14. Pienaar V.G. (2004) Viscous flow through sudden contractions. Dissertation. *Cape Peninsula University of Technology*.
15. Roache P.J. (1982) Computational Fluid Dynamics. *Hermosa: Albuquerque*. DOI: 10.1016/0041-5553(80)90297-9.
16. Godunov S.K., Ryabenkiy V.S. (1987) *Difference Schemes*. North-Holland: Elsevier Science Ltd.
17. Yanenko N.N. (1971) *The Method of Fractional Steps: The Solution of Problems of Mathematical Physics in Several Variables*. Springer-Verlag. DOI: 10.1007/978-3-642-65108-3.

18. Idel'chik I.E. (1966) *Handbook of Hydraulic Resistance*. Jerusalem: Israel Program for Scientific Translations.
19. Kochin N.E., Kibel' I.A., Roze N.V. (1964) *Theoretical Hydromechanics*. English translation of 5th Russian ed. New York: Wiley.
20. Monnet P., Menard C., Sigli D. (1982) Some new aspects of the slow flow of a viscous fluid through an axisymmetric duct expansion or contraction. II – Experimental part. *Appl. Sci. Res*. 39. pp. 233–248. DOI: 10.1007/BF00388666.
21. Boger D., Hur D., Binnington R. (1986) Further observations of elastic effects in tubular entry flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. 20. pp. 31–49. DOI: 10.1016/0377-0257(86)80014-3.
22. Kim-E M.E., Brown R.A., Armstrong R.C. (1983) The roles of inertia and shear-thinning in flow of an inelastic liquid through an axisymmetric sudden contraction. *J. Non-Newtonian Fluid Mech*. 13. pp. 341–363. DOI: 10.1016/0377-0257(83)80028-7.
23. Ajayi K.T., Papadopoulos G., Durst F. (1998) Influence of upstream development on the losses incurred by flow past an axisymmetric sudden contraction. *American Institute of Aeronautics and Astronautics AIAA-98-0794*.
24. Christiansen E.B., Kelsey S.J., Carter T.R. (1972) Laminar tube flow through an abrupt contraction. *AlChE Journal*. 18(2). pp. 372–380. DOI: 10.1002/aic.690180220.
25. Perry R.H., Green D.W., Maloney J.O. (1997) *Perry's chemical engineers' handbook*. 7th ed.: McGraw-Hill.
26. Vrentas J.S., Duda J.L. (1973) Flow of a Newtonian fluid through a sudden contraction. *Appl. Sci. Res*. 28. pp. 241–260. DOI: 10.1007/BF00413071.
27. Binding D.M. (1988) An approximate analysis for contraction and converging flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. 27(2). pp. 173–189. DOI: 10.1016/0377-0257(88)85012-2.

УДК 620.3
DOI 10.17223/19988621/48/5

А.М. Бубенчиков, М.А. Бубенчиков, О.Э. Колыхалова, Е.А. Тарасов

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНАЯ ПРОНИЦАЕМОСТЬ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ УКЛАДКИ ОТКРЫТЫХ НАНОТРУБОК

Рассмотрена однопараметрическая прямоугольная укладка открытых нанотрубок. Найдены кривые проницаемости для этого случая. Расчётами установлено, что проницаемость системы параллельных трубок не зависит от их длины и определяется входным профилем осредненной энергии взаимодействия укладки трубок. В адиабатическом случае, когда отсутствует обмен энергий с атомами кристаллической структуры, профиль энергии воздействия является инвариантным относительно продольных размеров трубки и симметричным по отношению к позициям вход – выход. В связи с этим, проницаемость оказалась зависящей лишь от поперечного размера трубок и степени их сближения друг с другом.

Ключевые слова: *молекулярная динамика*, *нанотрубка*, *прямоугольная укладка трубок*, *энергия взаимодействия трубки с молекулой*, *энергия слоя*, *проницаемость.*

Данные литературных источников [1] показывают, что средний продольный размер открытых углеродных нанотрубок диаметром порядка одного нанометра имеет величину порядка 10^3 нм. Такие трубки содержат около 10^5 атомов углерода. Поэтому изучать взаимодействие этих структур с молекулами и атомами газовых компонент лучше с использованием континуальных моделей распределения энергии по поверхности трубки [2–5].

Будем рассматривать движение молекул сквозь укладку открытых нанотрубок (рис. 1). Регулярное расположение трубок позволяет выявить фрагменты осреднения и правильно провести подсчет 2D-однородного распределения энергии в слое, которое в дальнейшем используется для решения 1D-задачи проникновения молекул через слой.

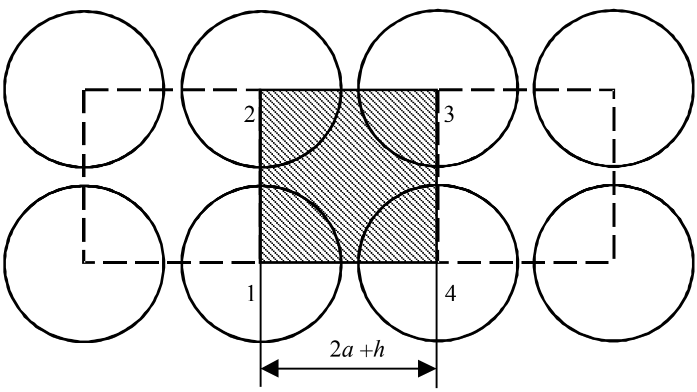


Рис. 1. Однопараметрическая прямоугольная укладка нанотрубок. Параметр укладки h
Fig. 1. Single-parameter rectangular stacking of nanotubes. h is the stacking parameter

Классический потенциал Леннарда – Джонса имеет слишком сильную особенность в нуле и не может быть проинтегрирован ни по поверхности, ни по объему. Не изменяя характера действия ван-дер-ваальсовских сил в определяющей области межмолекулярных расстояний, мы уменьшили величину особенности до значений $1/r$. Поэтому получившийся модифицированный слой можно проинтегрировать по двум направлениям, параллельным поверхности слоя, и получить 1D-распределение энергии слоя, которое затем используется как барьер в задаче о прохождении молекул (атомов) уже через однородный слой. Если взять классическую форму потенциала Леннарда – Джонса, то мы получим бесконечную энергию эквивалентного однородного слоя, а дальнейшие операции с этой энергией окажутся бессмысленными.

Однако, если взять короткий фрагмент трубки, например содержащий 12 атомов углерода по длине, для которого получается длина равной $l = 1.136$ нм, то вполне допустимым является изучение проницаемости на основе модели с дискретным расположением атомов углерода. При этом надо помнить, что задача о движении отдельной молекулы через структуру является шестипараметрической (три параметра положения и три компонента скорости) и требуется невероятное количество пусков молекул для определения коэффициента проницаемости нанопористой структуры. Поэтому в настоящей работе рассмотрен интегральный метод расчета проницаемости, и на его основе дается оценка степени разделения бинарной смеси Ch_4/He. Быстрые молекулы либо проходят через структуру, либо отражаются от нее, имея малоинформативную траекторию, низкоэнергетические же молекулы двигаются вокруг структуры по сложным траекториям. Такое орбитальное движение (рис. 2) хорошо показывает наличие зон проницаемости в структуре.

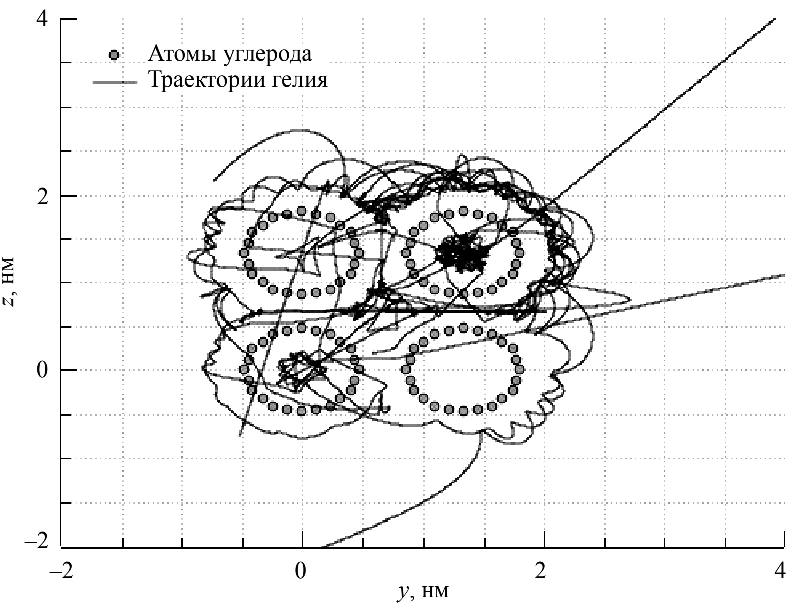


Рис. 2. Траектории движения низкоэнергетических молекул гелия
Fig. 2. Trajectories of the motion of low-energy helium molecules

На приведенном рисунке представлено несколько траекторий низкоэнергетических молекул, имеющих начальную скорость из диапазона [50, 100] м/с. Молекулы были пущены через укладку вдоль осей нанотрубок, однако они не вышли из слоя, составленного трубками, и были вовлечены в сорбционное движение. Однако медленные молекулы не играют определенной роли в вопросах проницаемости системы, и в дальнейшем будет учтен весь диапазон определяющих скоростей согласно распределению Максвелла.

Система углеродных атомов, составляющих структуру укладки нанотрубок, а также летящая пробная молекула являются гамильтоновой системой материальных тел, в которой полная энергия (кинетическая энергия молекулы и потенциальная энергия взаимодействия этой молекулы со всеми атомами углеродной структуры) остается постоянной во все время процесса. Это означает, что

$$E = T + V = E_0 = \text{const},$$

где E_0 – значение полной энергии системы на значительном удалении пробной молекулы от структуры, которое совпадает с начальным значением кинетической энергии молекулы. В связи с этим, если движение молекул, т.е. их скорости, определяющие потенциальную энергию будут рассчитаны «точно», то полная энергия системы должна оставаться постоянной величиной. Рисунок 3 демонстрирует изменение относительного значения полной энергии молекулы со временем в процессе ее движения в окрестности углеродной структуры. Как видим, имеются изменения, касающиеся лишь четвертого знака после запятой.

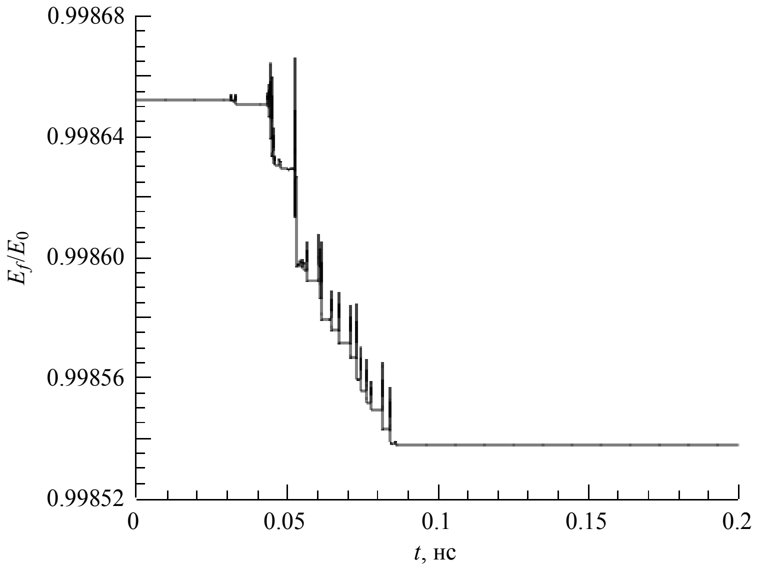


Рис. 3. Баланс энергии при расчетах движения молекулы гелия
Fig. 3. Energy balance in the calculations of the motion of a helium molecule

Анализ данных вычислений показывает, что каждый удар молекулы о структуру изменяет значение относительной величины полной энергии в пятом знаке после запятой. Причем это изменение является однонаправленным и всякий раз приводит к уменьшению рассчитанного значения кинетической энергии (численная диссипация энергии). Таким образом, если произойдет сто тысяч столкновений рассматриваемой пробной молекулы с углеродной структурой, то погрешность расчета энергии достигнет ста процентов. В то же время проведенные нами расчеты показывают, что при прохождении даже очень длинных нанотрубок происходит не более ста столкновений с их стенками.

Возьмем углеродную нанотрубку произвольной длины и найдем интегрированием её энергию взаимодействия с какой-либо молекулой. Таким образом, при сплошном интегрировании по поверхности 2D-материала мы должны иметь сходящуюся величину интегрального воздействия. Упомянутая выше модификация имеет следующий вид:

$$dU(\rho) = 4q\varepsilon\left(\frac{\sigma}{\rho}\right)\operatorname{th}\left[\left(\frac{\sigma}{\rho}\right)^{11} - \left(\frac{\sigma}{\rho}\right)^{5}\right]ds\,, \tag{1}$$

где dU – энергия выделенного фрагмента, ε, σ – параметры LJ – потенциала, ρ – расстояние между центром пробной молекулы и центром элементарной площади на поверхности 2D-материала, q – плотность распределения источников энергии на поверхности, ds – элементарная площадка на поверхности трубки. Для плоской или цилиндрической графеновой структуры легко найти, что $q{\approx}28$ нм$^{-2}$, а для сферической $q \approx 20$ нм$^{-2}$. Естественным образом, вводя цилиндрические координаты и интегрируя (1) по боковой поверхности открытой нанотрубки, получим

$$U(r,z) = 4\varepsilon aq\int_0^{2\pi}\int_0^{l}\left(\frac{\sigma}{\rho}\right)\operatorname{th}\left[\left(\frac{\sigma}{\rho}\right)^{11} - \left(\frac{\sigma}{\rho}\right)^{5}\right]d\varphi' dz'\,. \tag{2}$$

Причем $\rho = \sqrt{r^2 + a^2 - 2ar\cos\varphi' + (z - z')^2}$, a – радиус нанотрубки, l – ее длина, r, z – цилиндрические координаты, φ', z' – переменные интегрирования. Двукратное интегрирование в (2) можно выполнить численно, применяя для каждого из интегралов последовательно формулу трапеций.

Когда интегрирование в (2) завершено, мы можем найти среднее по радиусу значение потенциала. В этом случае проинтегрированный потенциал будет зависеть только от координаты z. Обозначим его через $W_1(z)$. Для оценки проницаемости прямоугольной укладки нанотрубок применим метод эквивалентного однородного слоя. Для случая укладки, показанной на рис. 3, этот метод применяется следующим образом. Потенциал (2) усредняется по радиусу, отложенному от оси отдельной трубки и имеющему размер, равный диагонали заштрихованного на приведенном рисунке квадрата. Точно так же он усредняется по другим квадратам, с помощью которых паркетируется вся рассматриваемая область. Найденное среднее значение потенциала $W_1(z)$ определяется влиянием одной из трубок. Так как в рассматриваемом случае ближайшими соседями будут четыре трубки, то по соображениям симметрии среднее значение потенциала в заштрихованной области будет $W(z) = 4W_1(z)$. Влиянием других трубок пренебрегаем, поскольку их вклады оказываются реально малыми. После того как найден усредненный по поверхности слоя потенциал, мы можем пустить пробную молекулу перпендикулярно заштрихованной области, т.е. вдоль осей параллельной укладки трубок. Проходя через однородный слой, такая молекула не будет испытывать силовых воздействий, отклоняющих ее от прямолинейной траектории. Поэтому уравнение движения такой молекулы будет одномерным:

$$m\frac{dw}{dt} = -\operatorname{grad} W(z)\,. \tag{3}$$

Здесь m – масса проникающей через слой молекулы, w – нормальная по отношению к нанопористому слою компонента скорости.

Проницаемость слоя определяется лишь поперечным движением, поэтому можно считать, что решение этого уравнения заключает в себе всю статистику, связанную с местоположением пуска молекулы относительно трубок, составляющих элемент паркетирования. Статистику по величинам скоростей мы постараемся учесть с помощью распределения Максвелла, которое имеет следующий вид:

$$f(v) = \frac{dN}{Ndv} = \frac{4v^2}{\sqrt{\pi}}\lambda^{3/2}e^{-\lambda v^2}. \tag{4}$$

Здесь $\lambda = \dfrac{m}{2kT}$, f – функция распределения, v – модуль скорости молекулы k – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура, N – количество молекул в единице объема, dN – доля молекул, скорости которых находятся в интервале $[v, v+dv]$.

Практические расчеты показывают, что если при определенной скорости молекула проходит укладку нанотрубок, то она ее проходит и при большей величине скорости. Так что находя минимальную скорость прохождения и интегрируя далее распределение Максвелла от этой величины и до бесконечности, мы найдем долю молекул, проходящих через укладку. Значения минимальных скоростей для атомов гелия и молекул метана для рассматриваемой прямоугольной укладки трубок приведены на рис. 5. На следующем рисунке представлены распределения по коэффициентам проницаемости также для гелия и метана. Из рис. 6 видно, что при $0.3 \le h \le 1.0$ нм структура дает хорошее разделение по коэффициенту проницаемости, т.е. работает, как сепаратор.

Для интегрирования последнего уравнения вполне пригодным является стандартный вариант схемы Рунге-Кутты четвертого порядка точности.

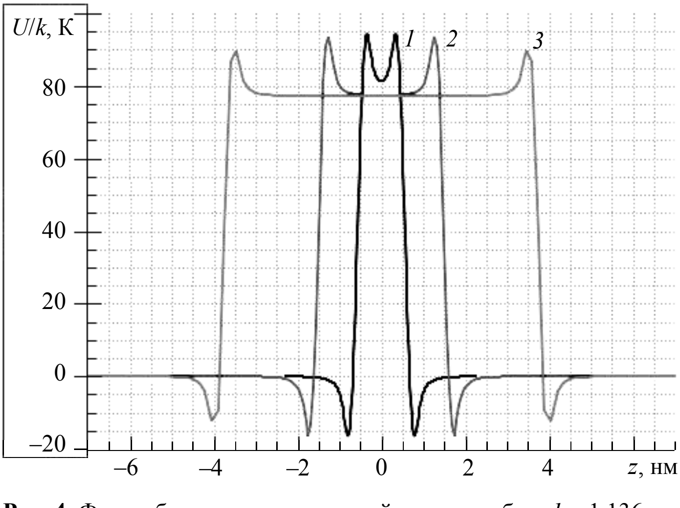


Рис. 4. Форма барьера при различной длине трубок, *1* – 1.136 нм, *2* – 3 нм, *3* – 7.5 нм. Здесь *U*/*k* – относительная энергия, измеренная в градусах Кельвина, *k* – постоянная Больцмана

Fig. 4. Barrier shape at different tube lengths, (*1*) 1.136; (*2*) 3; and (*3*) 7.5 nm. Here, *U*/*k* is a relative energy in degrees Kelvin and *k* is the Boltzmann constant

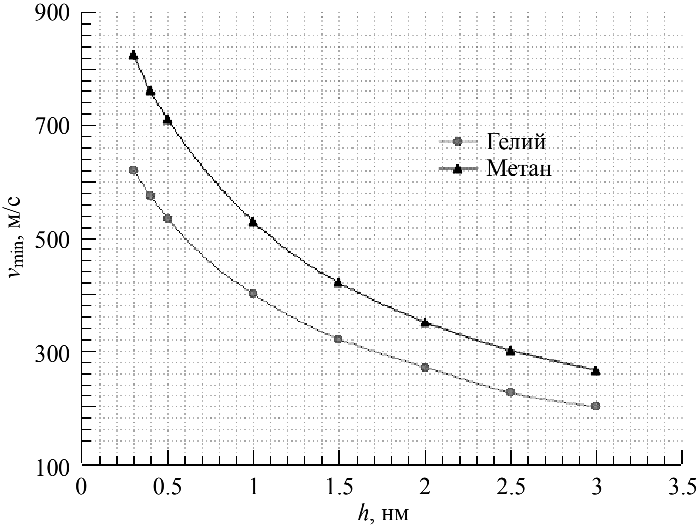


Рис. 5. Предельная скорость проницаемости прямоугольной укладки
Fig. 5. Limiting permeability rate of the rectangular stacking

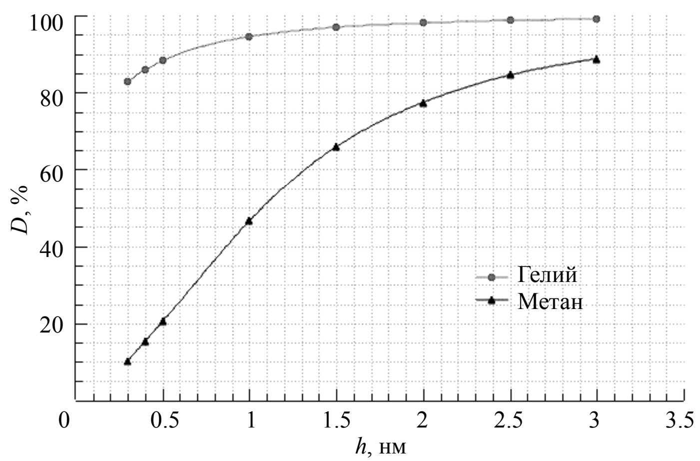


Рис. 6. Кривая проницаемости прямоугольной укладки нанотрубок в отношении атомов гелия и молекул метана
Fig. 6. Permeability curve of the rectangular stacking of nanotubes with respect to helium atoms and methane molecules

На рис. 1 показана прямоугольная регулярная укладка трубок. Прямоугольниками показаны области, по которым проводится осреднение энергии взаимодействия вдоль поверхности проницаемого слоя (перпендикулярно оси трубок). На рис. 4 представлены распределения средней энергии взаимодействия укладки с пробной молекулой по длине трубок, то есть поперек слоя. Видно, что входной и выходной профили инвариантны относительно длины трубок, а в центральной части протяженной части трубки энергия остается постоянной. Это означает, что молекулы в этой зоне в осевом направлении двигаются по инерции. Рис. 5 демонстрирует, что предельные скорости прохождения и гелия и метана немного отличаются. При этом наиболее вероятные скорости движения отличаются в два раза (650 м/с, 1300 м/с). Эти различия сказываются, в конечном счете, в пользу гелия. В связи с этим проницаемость слоя в отношении гелия существенно выше (рис. 6).

Заключение

Таким образом, расчеты, проведенные в рамках адиабатического приближения показывают, что проницаемость укладки трубок длиной 1.136 нм такая же как у трубок длиной 10^2 нм. Предложенная схема расчета проницаемости позволяет для заданного сорта молекул найти предельную минимальную скорость прохождения однородного слоя и по её величине оценить степень прохождения молекул через этот слой. Сопоставляя полученные для различных компонент исходной смеси величины проницаемостей, мы можем сделать заключения о селективных свойствах слоя нанотрубок и структур созданных на их основе. В настоящей работе также установлено, что, по крайней мере, для прямоугольной укладки трубок слой работает как сепаратор при величинах сближения трубок h от 0.32 до 1 нм.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Елецкий А.В.* Углеродные нанотрубки // Успехи физических наук. 1997. Т. 167. № 45. С. 945–972.
2. *Рудяк В.Я.*, *Краснолуцкий С.Л.*, *Иванов Д.А.* Моделирование диффузии наночастиц в газах и жидкостях методом молекулярной динамики // Оптика атмосферы и океана. 2011. Т. 24. № 6. С. 529–533.
3. *Rudyak V.Ya.*, *Belkin A.A.*, *Egorov V.V.*, *Ivanov D.A.* // Int. J. Multiphysics. 2011. V. 5. No. 2. P. 145–155.
4. *Бубенчиков М.А.*, *Потекаев А.И.*, *Бубенчиков А.М.* Термофорез ультрамелких и наноразмерных частиц // Изв. вузов. Физика. 2013. Т. 56. № 7. С. 57–61.
5. *Потекаев А.И.*, *Бубенчиков А.М.*, *Бубенчиков М.А.* Новые физические представления и метод описания и расчета сопротивления движению малых частиц в газообразной среде // Изв. вузов. Физика. 2012. Т. 55. № 12. С. 54–61.

Статья поступила 09.03.2017 г.

Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A., Kolykhalova O.E., Tarasov E.A. (2017) DIFFERENTIAL PERMEABILITY OF A RECTANGULAR STACKING OF NANOTUBES WITH OPEN TIPS. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics.* 48. pp. 49–56

DOI 10.17223/19988621/48/5

The paper proposes an evaluation scheme of differential permeability of a layer composed of carbon nanotubes with open tips on the basis of Newtonian mechanics. This idea is based on the method of equivalent uniform layer. Averaging of interaction energy is performed along the flat elementary cell located perpendicularly to the axis of the tubes. The entire surface of the permeable layer is parqueted with such cells. Low-energy molecules do not pass the uniform layer. However, at a certain speed, the stacking of nanotubes becomes permeable. The determined minimum speed and the Maxwell distribution allow obtaining the percentage of molecules that have passed through the layer of the stacking tubes. In this work, a single-parameter rectangular stacking of nanotubes is considered. For this case, the permeability curves have been plotted. Based on the calculations, it has been stated that the permeability of the system of parallel nanotubes with open tips does not depend on their length and it is defined by the inlet profile of the averaged interaction energy of the tube's stacking. Therefore, the profile under adiabatic conditions lack of the energy exchange with the carbon atoms of tube crystal structure) is invariant with respect to longitudinal dimensions of the tube and symmetrical with respect to the input – output positions. In this regard, the permeability has been found to be dependent only on the transverse dimension of the tubes and the ratio of their convergence.

Keywords: molecular dynamics, nanotube, rectangular stacking of the tubes, interaction energy of the tube and molecule, energy of the layer, permeability.

BUBENCHIKOV Aleksey Mikhaylovich (Doctor of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation).
E-mail: aleksy121@mail.ru

BUBENCHIKOV Mikhail Alekseevich (Candidate of Physics and Mathematics, Gazprom Transgaz Tomsk Ltd., Tomsk, Russian Federation).
E-mail: michael121@mail.ru

KOLYKHALOVA Olga Eduardovna (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation).
E-mail: ms.friol@mail.ru

TARASOV Egor Aleksandrovich (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation).
E-mail: dio-medTS@mail.ru

REFERENCES

1. Eletskiy A.V. (1997) Carbon nanotubes. *Advances in Physical Sciences*. 45(167). pp. 945–972.
2. Rudyak V.Ya., Krasnolutskiy S.L., Ivanov D.A. (2011) Modeling of diffusion of the nanoparticles in gases and liquids by the molecular dynamics method. *Atmospheric and Oceanic Optics*. 24(6). pp. 529–533.
3. Rudyak V.Ya., Belkin A.A., Egorov V.V., Ivanov D.A. (2011) About fluids structure in microchannels. *The International Journal of Multiphysics*. 5(2). pp. 145–155. DOI: 10.1260/1750-9548.5.2.145.
4. Bubenchikov M.A., Potekaev A.I., Bubenchikov A.M. (2013) Thermophoresis of ultrafine and nanosized particles. *Russian Physics Journal*. 56(7). pp. 785–790. DOI: 10.1007/s11182-013-0100-y.
5. Potekaev A.I., Bubenchikov A.M., Bubenchikov M.A. (2013) New physical ideas and method of description and calculation of resistance to motion of small particles in a gaseous medium. *Russian Physics Journal*. 55(12). pp. 1434–1443. DOI: 10.1007/s11182-013-9977-8.

ВЕСТНИК ТОМСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА
2017 Математика и механика № 48

УДК 532.5; 532.72
DOI 10.17223/19988621/48/6

В.А. Демин, М.И. Петухов

КРУПНОМАСШТАБНЫЙ ПЕРЕНОС КОМПОНЕНТОВ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ РАСПЛАВОВ В ТОНКИХ КАПИЛЛЯРАХ[1]

Выполнено прямое численное моделирование термоконцентрационной конвекции бинарного металлического расплава, заключенного в тонком вертикально ориентированном капилляре при наличии на его боковой поверхности градиента температуры, направленного вертикально вверх. Особое внимание в ходе расчетов было уделено объяснению эффекта продольного разделения смеси на компоненты. Само явление достоверно воспроизводится в разных по постановке экспериментах, однако до сих пор не имеет теоретического обоснования. В предлагаемой модели сделана попытка учесть наиболее важные физические факторы, необходимые для того, чтобы воспроизвести в расчетах все основные эффекты, наблюдаемые в опыте. По результатам вычислительного эксперимента было подтверждено, что наличие продольных градиентов температуры и концентрации совместно с условием несмачивания на боковой поверхности создает опускное термокапиллярное течение, которые вкупе с эффектами адсорбции-десорбции влекут за собой образование объемной неоднородности концентрации компонентов смеси в капилляре.

Ключевые слова: *концентрационная конвекция*, *свободная поверхность*, *термо- и концентрационно-капиллярные эффекты*, *адсорбционно-десорбционные процессы*.

В настоящее время объяснение в рамках механики сплошных сред широкого спектра явлений, связанных с тепло- и массопереносом, часто требует учета такого фактора, как наличие у системы свободной поверхности. Упомянутые процессы возникают при решении множества задач, имеющих как фундаментальное, так и прикладное значение: с ними можно столкнуться в металлургии, при управлении химическими реакциями, в ходе промышленной очистки воды и т.д. Помимо определенных процессов, происходящих в объеме, важные специфические явления могут развиваться на поверхности рассматриваемой среды. Так как константы переноса на межфазных поверхностях имеют, как правило, существенно иные значения, а на самих поверхностях в силу определенных ограничений разыгрываются обособленные от объема явления, тонкие поверхностные слои часто приходится рассматривать как отдельную двумерную область, описываемую особыми уравнениями. Наука о совместном взаимосогласованном поведении подобных фаз (объема и поверхности) называется межфазной гидродинамикой [1]. Одним из явлений, для объяснения которого потребовалось привлечь идеи межфазной гидродинамики, оказался эффект перераспределения компонентов металлических расплавов в тонких капиллярах.

Впервые упомянутое явление было обнаружено и детально экспериментально описано в работе [2]. Тонкий алундовый капилляр, заполненный однородной

[1] Работа поддержана грантом РФФИ (№ 16-01-00662 *а*) «Особенности описания термокапиллярной конвекции в бинарных системах жидкостей с поверхностно-активной компонентой».

двухкомпонентной смесью жидких легкоплавких металлов (Sn–Pb, Cd–Bi или Al–Si) в вертикальном положении помещался в печь при температуре, когда оба компонента находились в расплавленном состоянии. Спустя время ~ 1 ч его вынимали и немедленно остужали, алундовое покрытие удалялось, после чего изучалось распределение компонентов сплава в продольном сечении. Многочисленные эксперименты показали, что одного часа выдержки в печи было вполне достаточно, чтобы продольное разделение смеси выходило на асимптотическое значение. Измерения давали достаточно большой перепад концентрации компонентов вдоль капилляра (~1–20 %) с характерным нелинейным распределением, отвечающим уменьшению концентрации тяжелого компонента с высотой.

Следует отметить, что высота капилляров варьировалась от 40 до 220 мм, что на один-два порядка превышало их диаметр, который, в свою очередь, составлял от 0.8 до 1.2 мм. Наличие однородных, на первый взгляд, условий по температуре и отмеченное выше соотношение продольного и поперечного размеров капилляра позволило в работе [3] сделать предположение об отсутствии конвекции внутри капилляра, что привело к попытке объяснения данного эффекта при помощи гравитационного оседания. Для этого была решена задача о броуновском движении частиц, поведение которых описывалось с помощью уравнения Фоккера – Планка. При этом оседающие частицы представляли собой конгломераты атомов, которые образовывались в процессе ликвации. Однако оказалось, что полученное стационарное решение для предельного по времени случая не позволило удовлетворительно описать данное явление. Расчетное время седиментации оказалось на много порядков больше, чем в экспериментах даже для достаточно крупных по величине конгломератов, вообще не содержащих чужеродных атомов. В ходе дальнейших экспериментов состав этих частиц, а также их радиус, который в задаче играл роль параметра, так и остались неопределенными. Последующая попытка оценить радиус этих частиц, используя данные рентгеноструктурного анализа, так и не дала положительного результата.

С другой стороны, известно, что процессы перераспределения компонентов жидких смесей в тонких слоях и каналах обладают множеством особенностей. В [4] была аналитически решена задача о влиянии термодиффузии на гравитационное оседание наночастиц в несущей жидкости, заполняющей тонкий вертикальный неоднородно нагретый канал. Точное аналитическое решение в виде рядов позволило проследить за эволюцией полей температуры и концентрации наночастиц для разных значений коэффициента термодиффузии. Показано, что полученное решение может быть положено в основу методики экспериментального измерения коэффициента термодиффузии для наножидкостей, что является весьма актуальной проблемой применительно к магнитным жидкостям, физические свойства которых могут сильно отличаться друг от друга ввиду разных способов изготовления подобных сред. Было установлено, что для размеров феррочастиц ~ 10–20 нм гравитационное оседание может привести к хотя бы сколько-то ощутимому эффекту только по прошествии времени ~10^6 с. Иными словами, седиментационные эффекты для наноразмерных частиц чрезвычайно слабы, а характерные времена оседания измеряются месяцами и даже годами. Напротив, учет конвективного механизма переноса в задаче [5] о самопроизвольном остывании и замерзании водного раствора Na_2SO_4 в тонком вертикальном канале позволил с учетом эффекта термодиффузии объяснить процесс крупномасштабного продольного перераспределения примеси вдоль канала в течение короткого времени ~ 10 мин, что было подтверждено прямыми экспериментальными измерениями. Таким образом, в самых разнообразных ситуациях, когда действуют те или иные физические механизмы переноса, быстрое крупномасштабное продольное разделение компонентов жидких смесей в тонких каналах имеет место только при наличии конвективного перераспределения.

Так, попытка объяснить результаты опытов [2] путем включения в модель термокапиллярного конвективного переноса была сделана в работе [6]. В ней рассматривался вертикальный капилляр, заполненный однородной двухкомпонентной смесью жидких металлов. Ранее в ходе опытов было замечено неожиданное поведение на границе раздела между расплавом и твердой алундовой поверхностью при организации крупномасштабного тепломассопереноса вдоль капилляра. Из анализа распределения компонентов в поперечном сечении вытекало заключение, что тяжелый компонент расплава сначала выдавливается на поверхность, затем «стекает», как по свободной поверхности вниз, и диффундирует обратно в массив. Очевидно, за подобным поведением в системе должна стоять соответствующая термодинамическая сила. В данном случае роль термодинамической силы может играть градиент температуры. Если специальным образом не контролировать распределение температуры в рабочей камере печи, то при перепаде 10–20 см по высоте вполне допустимо образование тепловой шапки с разницей по температуре порядка 1 К. Таким образом, вследствие естественных процессов теплообмена на вертикальных гранях капилляра во время выдержки в печи может устанавливаться градиент температуры, направленный вертикально вверх. Как дополнение, в силу специфики используемых в эксперименте материалов (легкоплавкие металлы в качестве рабочей жидкости и алундовые стенки капилляра), считается, что на вертикальных гранях справедливо условие полного несмачивания. На образованной таким образом вертикальной свободной поверхности имеет место температурная неоднородность поверхностного натяжения, которая приводит к генерации термокапиллярного течения. Помимо этого, учитывается механизм адсорбции-десорбции тяжелого компонента на свободной поверхности.

Численное решение полных нелинейных уравнений термоконцентрационной конвекции, как и ожидалось, приводило к появлению опускного течения на поверхности. Примесь, скапливающаяся в нижней части капилляра, из-за эффекта десорбции проникала в объем и, за счет подъемного течения в центре капилляра, конвективно переносилась вверх. В итоге создавалось характерное нелинейное распределение вдоль оси капилляра, которое гораздо лучше согласовывалось с экспериментом, нежели результаты работы [3]. Таким образом, был реализован крупномасштабный перенос компонентов смеси, приводящий к разности концентраций ~ 1–5 % между торцами капилляра за относительно быстрое время (~10 мин). Эффект разделения на компоненты оказался не столь сильным, как ожидалось. Помимо этого, не все используемые параметры соответствовали жидким металлам ($\mathrm{Pr} = 0.5$). Тем не менее в данной работе было убедительно показано, что при учете крупномасштабного конвективного переноса за счет температурной неоднородности поверхностного натяжения время разделения и продольный концентрационный профиль качественно совпадали с опытом.

С другой стороны, известно [7], что помимо зависимости поверхностного натяжения от температуры, в концентрационных задачах всегда присутствует не менее сильная связь поверхностного натяжения с неоднородностями концентрации поверхностного компонента, что способно оказывать существенное влияние на динамику исследуемой системы. Учет этого фактора позволяет сделать постановку задачи более физичной и, как будет показано ниже, количественно дает результаты, более близкие к экспериментальным данным.

Постановка задачи

Рассмотрим вертикально ориентированный капилляр, полностью заполненный однородной двухкомпонентной смесью жидких металлов (рис. 1). На вертикальных границах капилляра поддерживается постоянный градиент температуры, направленный вертикально вверх, что соответствует подогреву сверху.

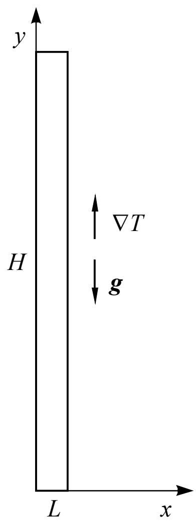


Рис. 1. Геометрия задачи. Система координат
Fig. 1. Geometry of the problem. Coordinate system

Для описания конвективных течений жидкой бинарной смеси воспользуемся системой гидродинамических уравнений в приближении Буссинеска [8]:

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t}+(\boldsymbol{v}\nabla)\boldsymbol{v}=-\frac{1}{\rho}\nabla p+\nu\Delta\boldsymbol{v}+g(\beta_T T-\beta_C C)\boldsymbol{\gamma}\,; \qquad (1)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}+(\boldsymbol{v}\nabla)T=\chi\Delta T\,,\ \operatorname{div}\boldsymbol{v}=0\,; \qquad (2)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t}+(\boldsymbol{v}\nabla)C=D\Delta C\,, \qquad (3)$$

где $\boldsymbol{v}$, p, T, C – соответственно поля скорости, давления, температуры и объемной концентрации тяжелого компонента смеси, β_T, β_C – коэффициенты температурного и концентрационного изменения плотности, ρ – плотность смеси, χ, ν, D – соответственно коэффициенты температуропроводности, кинематической вязкости и диффузии, g – величина ускорения свободного падения, $\boldsymbol{\gamma}$ – единичный вектор, направленный вертикально вверх.

На боковых свободных поверхностях концентрация описывалась отдельным уравнением, в котором были учтены эффекты адсорбции-десорбции [1, 9, 10]:

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t}+\nabla^S(\boldsymbol{v}\Gamma)=D_S\Delta^S\Gamma+k_\mathrm{A}C-k_\mathrm{D}\Gamma\,, \qquad (4)$$

где Γ – поверхностная концентрация, k_A, k_D – коэффициенты адсорбции и десорбции, D_S – коэффициент поверхностной диффузии. Индекс s над операторами означает дифференцирование по координатам поверхности. В качестве упрощения будем предполагать, что горизонтальные торцы капилляра являются твердыми и непроницаемыми для вещества. Таким образом, пусть на них выполняются условия прилипания и отсутствия потока вещества через границу:

$$y=0, H:\ \boldsymbol{v}=0\,,\ \frac{\partial \Gamma}{\partial y}=0\,,\ \frac{\partial C}{\partial y}=0\,,\ T=0, \Theta. \qquad (5)$$

На свободных вертикальных границах имеет место линейное распределение температуры. Кроме того необходимо учесть явления адсорбции-десорбции. Закон сохранения массы на поверхности с учетом всех возможных потоков вещества [7, 10, 11] позволяет связать объемную и поверхностную концентрацию следующими условиями:

$$x=0, L:\ -D\frac{\partial C}{\partial x}=\mp k_\mathrm{A}C\pm k_\mathrm{D}\Gamma\,,\ T=\Theta y/H, \qquad (6)$$

Далее обезразмерим уравнения (1) – (4) и граничные условия (5) – (6), приняв за единицы измерения расстояния, времени, скорости, температуры, давления, объемной и поверхностной концентрации следующие величины: L, L^2/ν, χ/L, Θ, $\rho\nu\chi/L^2$, $\Theta\beta_T/\beta_C$, $\Theta\beta_T L/\beta_C$. Здесь L – толщина канала, Θ – перепад температуры между торцами капилляра. После процедуры обезразмеривания уравнения и граничные условия записываются в следующей форме:

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t}+\frac{1}{\Pr}(\boldsymbol{v}\nabla)\boldsymbol{v}=-\nabla P+\Delta\boldsymbol{v}+\mathrm{Ra}(\vartheta-\Sigma)\boldsymbol{\gamma}\,; \tag{7}$$

$$\Pr\frac{\partial\vartheta}{\partial t}+(\boldsymbol{v}\nabla)\vartheta=\Delta\vartheta\,,\ \operatorname{div}\boldsymbol{v}=0\,; \tag{8}$$

$$\frac{\partial\Sigma}{\partial t}+\frac{1}{\Pr}(\boldsymbol{v}\nabla)\Sigma=\frac{1}{\mathrm{Sc}}\Delta\Sigma\,; \tag{9}$$

$$\frac{\partial\zeta}{\partial t}+\frac{1}{\Pr}\nabla^S(\boldsymbol{v}\zeta)=\frac{1}{\mathrm{Sc}_S}\Delta^S\zeta+k_+\Sigma-k_-\zeta\,; \tag{10}$$

$$x=0,1:\ v_x=0\,,\ -\frac{1}{\mathrm{Sc}}\frac{\partial\Sigma}{\partial x}=\mp k_+\Sigma\pm k_-\zeta\,,\ \vartheta=\frac{y}{h}\,; \tag{11}$$

$$y=0,h:\ \boldsymbol{v}=0\,,\ \frac{\partial\zeta}{\partial y}=0\,,\ \frac{\partial\Sigma}{\partial y}=0\,,\ \vartheta=0,1\,, \tag{12}$$

где $\boldsymbol{v}$, P, ϑ, Σ, ζ – соответственно безразмерные поля скорости, давления, температуры, объемной и поверхностной концентрации тяжелого компонента. В граничных условиях h – безразмерная высота капилляра. Краевая задача (7) – (12) содержит следующий набор управляющих параметров:

$$\mathrm{Ra}=\frac{g\beta_T\Theta L^3}{\nu\chi}\,,\ \Pr=\frac{\nu}{\chi}\,,\ \mathrm{Sc}=\frac{\nu}{D}\,,\ \mathrm{Sc}_S=\frac{\nu}{D_S}\,,\ k_+=\frac{k_A L}{\nu}\,,\ k_-=\frac{k_D L^2}{\nu}\,;$$

Ra, Pr, Sc – числа Рэлея, Прандтля и Шмидта, Sc_S – поверхностное число Шмидта. Параметры k_+, k_- имеют смысл безразмерных коэффициентов адсорбции и десорбции. Задача решалась в терминах функции тока ψ и скалярной функции φ, совпадающей с точностью до знака с завихренностью:

$$v_x=\frac{\partial\psi}{\partial y}\,,\ v_y=-\frac{\partial\psi}{\partial x}\,,\ \varphi=\Delta_1\psi\,,\ \Delta_1=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\,.$$

Таким образом, уравнения (7) – (10) окончательно преобразовывались к виду

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t}+\frac{1}{\Pr}\left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial\varphi}{\partial x}-\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)=\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}-\mathrm{Ra}\left(\frac{\partial\vartheta}{\partial x}-\frac{\partial\Sigma}{\partial x}\right);$$

$$\Pr\frac{\partial\vartheta}{\partial t}+\frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial\vartheta}{\partial x}-\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\vartheta}{\partial y}=\frac{\partial^2\vartheta}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\vartheta}{\partial y^2}\,;$$

$$\frac{\partial\Sigma}{\partial t}+\frac{1}{\Pr}\left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\frac{\partial\Sigma}{\partial x}-\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial\Sigma}{\partial y}\right)=\frac{1}{Sc}\left(\frac{\partial^2\Sigma}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\Sigma}{\partial y^2}\right);$$

$$\frac{\partial\zeta}{\partial t}-\frac{1}{\Pr}\frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\zeta\right)=\frac{1}{\mathrm{Sc}_S}\frac{\partial^2\zeta}{\partial y^2}+k_+\Sigma-k_-\zeta\,.$$

Для учета термо- и концентрацинно-капиллярного механизмов на свободных боковых границах зависимость поверхностного натяжения от температуры и поверхностной концентрации рассматривалась в линейном приближении:

$$\sigma = \sigma_0 - \sigma_T T - \sigma_\Gamma \Gamma . \tag{13}$$

Условие баланса касательных напряжений на границе дает следующие граничные условия:

$$x = 0:\ \eta \frac{\partial v_y}{\partial x} = \sigma_T \frac{\partial T}{\partial y} + \sigma_\Gamma \frac{\partial \Gamma}{\partial y},\ x = L:\ \eta \frac{\partial v_y}{\partial x} = -\sigma_T \frac{\partial T}{\partial y} - \sigma_\Gamma \frac{\partial \Gamma}{\partial y},$$

где η – динамическая вязкость. После обезразмеривания эти граничные условия приводятся к виду

$$x = 0:\ \varphi = -\mathrm{Ma}_T \frac{\partial \vartheta}{\partial y} - \mathrm{Ma}_\Gamma \frac{\partial \zeta}{\partial y},\ x = 1:\ \varphi = \mathrm{Ma}_T \frac{\partial \vartheta}{\partial y} + \mathrm{Ma}_\Gamma \frac{\partial \zeta}{\partial y},$$

где Ma_T и Ma_Γ – температурное и концентрационное числа Марангони:

$$\mathrm{Ma}_T = \sigma_T \frac{\Theta L}{\eta\chi},\ \mathrm{Ma}_\Gamma = \sigma_\Gamma \frac{\Theta \beta_T L^2}{\beta_c \eta \chi}.$$

Описание численной процедуры

Описанная система уравнений решалась методом конечных разностей. Алгоритм был разработан в соответствии с явной схемой решения уравнений в частных производных и основан на двухполевой методике [12]. При аппроксимации производных по времени и производных по координатам использовались соответственно односторонние и центральные разности. Шаг по времени вычислялся в соответствии с устойчивостью счета по формуле $\Delta t = \min\{h_x^2, h_y^2\}/4\delta$, где h_x, h_y – шаги вдоль осей x и y, δ – эмпирический параметр больше единицы. При решении уравнения Пуассона для функции тока применялся метод простых итераций. В ходе расчетов использовался метод установления. Компьютерный код был реализован на языке программирования FORTRAN-90. Система уравнений решалась на суперкомпьютере «ПГУ–Тесла» Научно-образовательного центра Пермского государственного национального исследовательского университета «Параллельные и распределенные вычисления». При проведении численного моделирования осуществлялась периодическая запись искомых полей на диск, что позволяло анализировать структуру полей в каждый момент времени. Следует отметить, что для повышения точности и устойчивости счета в граничных условиях (11) на потоки вещества, а также в нелинейном слагаемом уравнения (10) для поверхностной концентрации производные полей функции тока и концентрации находились при помощи пятиточечной аппроксимации:

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \mp \frac{25 f_0 - 48 f_{\pm 1} + 36 f_{\pm 2} - 16 f_{\pm 3} + 3 f_{\pm 4}}{12 h_x}.$$

Здесь нижний индекс означает номер узла по мере удаления от границы, положение которой определяется индексом 0; h_x – шаг по координате x. Естественными начальными условиями служили невозмущенные поля функции тока ($\psi = 0$), завихренности ($\varphi = 0$), объемной ($C = 0.05$) и поверхностной концентрации ($\Gamma = 0$). В поле температуры внутри капилляра в начальный момент времени также отсутствовали возмущения ($T = 0$), однако на поверхности задавалось ее линейное распределение так, чтобы градиент был направлен вверх. Предварительно, с целью контроля сходимости результатов, были выполнены расчеты на разных сетках. В таблице приведены значения относительной погрешности расчета (в процентах) в зависимости от общего числа узлов на этапе установления.

Таблица сходимости результатов

Номер строки	N_1 – число узлов по x	N_2 – число узлов по y	$N = N_1 \cdot N_2$ – общее число узлов	Относительная разность суммарных кинетических энергий, %	Относительная разность максимумов функции тока, %
1	23	369	8487	$\Delta_{12} = 2.893$	0.2021
2	**21**	**311**	**6531**	$\Delta_{23} = 3.578$	0.2210
3	19	265	5035	$\Delta_{34} = 4.538$	0.3204
4	17	229	3893	$\Delta_{45} = 5.946$	1.0239
5	15	199	2985	$\Delta_{56} = 8.153$	2.6181
6	13	177	2301	$\Delta_{67} = 11.92$	4.2931
7	11	161	1771		

Представленные табличные данные, визуализированные на рис. 2, демонстрируют удовлетворительную сходимость как по максимуму функции тока, так и суммарной кинетической энергии.

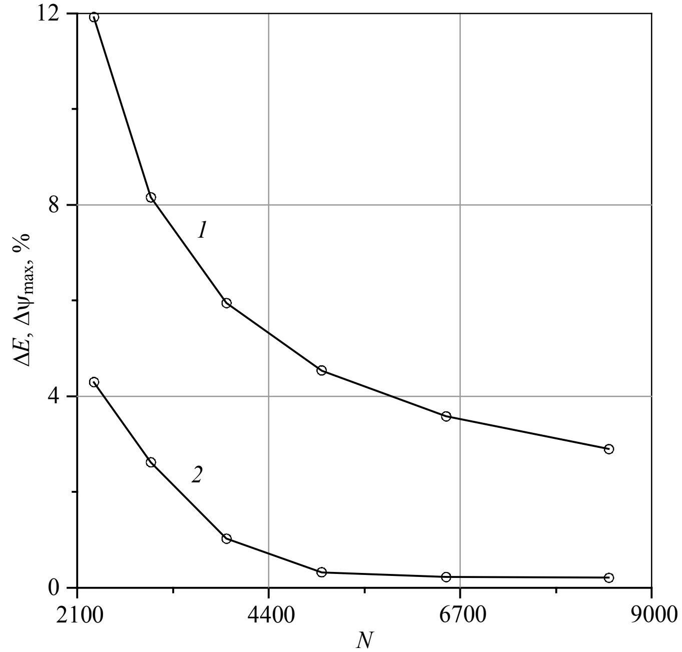


Рис. 2. Относительная погрешность для суммарной кинетической энергии (%, кр. *1*) и максимума функции тока (%, кр. *2*) в зависимости от общего числа узлов

Fig. 2. Relative error for the total kinetic energy (%, curve *1*) and maximum stream function (%, curve *2*) as functions of the number of mesh points

В результате в ходе численного моделирования использовалась рабочая сетка 21×311 = 6531, при этом высота канала бралась много больше толщины ($h = 30$). Расчеты проводились при некоторых фиксированных значениях параметров: Ra = 0.005, Pr = 0.05, Sc = 300, $\mathrm{Sc}_S = 200$, $k_+ = 0.0001$, $k_- = 0.054$.

Обсуждение результатов

Численное моделирование с учетом более сложной зависимости коэффициента поверхностного натяжения от температуры и концентрации (13) показало, что в процессе разделения устанавливается достаточно сильный перепад концентрации компонентов (~ 20 %), что значительно больше по величине, нежели в [6]. Этот результат гораздо лучше соотносится с экспериментом [2]. Характерные профили концентрации, функции тока и температуры представлены на рис. 3.

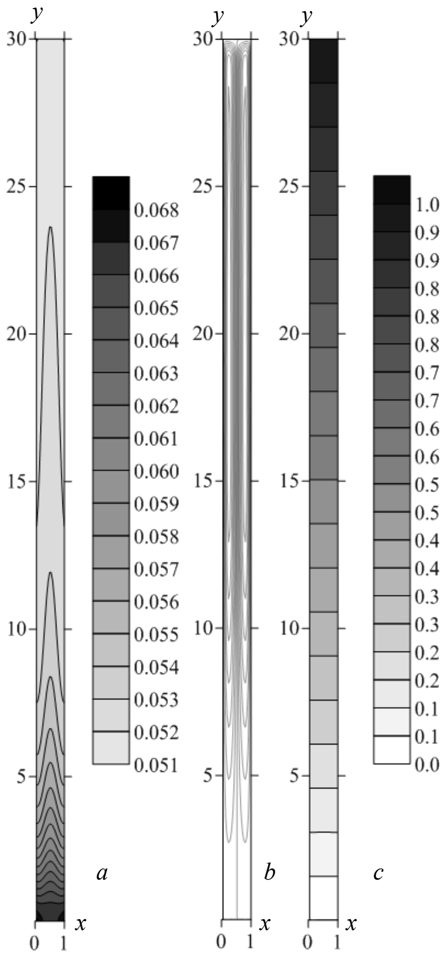


Рис. 3. Поля концентрации (*a*), функции тока (*b*) и температуры (*c*) при $\mathrm{Ma}_T = 8$ и $\mathrm{Ma}_\Gamma = 7$ в момент времени $t = 800$

Fig. 3. Fields of the (*a*) concentration, (*b*) stream function, and (*c*) temperature at $\mathrm{Ma}_T = 8$ and $\mathrm{Ma}_\Gamma = 7$ at the instant $t = 800$

Видно, что конвективный перенос порождается термокапиллярными силами и охватывает весь капилляр. Как и в эксперименте, наиболее сильные неоднородности концентрации формируются в нижней части капилляра, где накапливается тяжелый компонент смеси. Данный эффект объясняется тем, что опускное течение на поверхности относительно быстро перемещает примесь к нижнему торцу капилляра. Таким образом, именно профиль поверхностной концентрации, в конечном счете, формирует объемное распределение тяжелого компонента. При сравнении профилей поверхностной и объемной концентрации (рис. 4 и 5) можно увидеть их подобие. Особенно хорошо согласуется с экспериментом продольное распределение объемной концентрации, которое практически является экспоненциальным за исключением торцов капилляра.

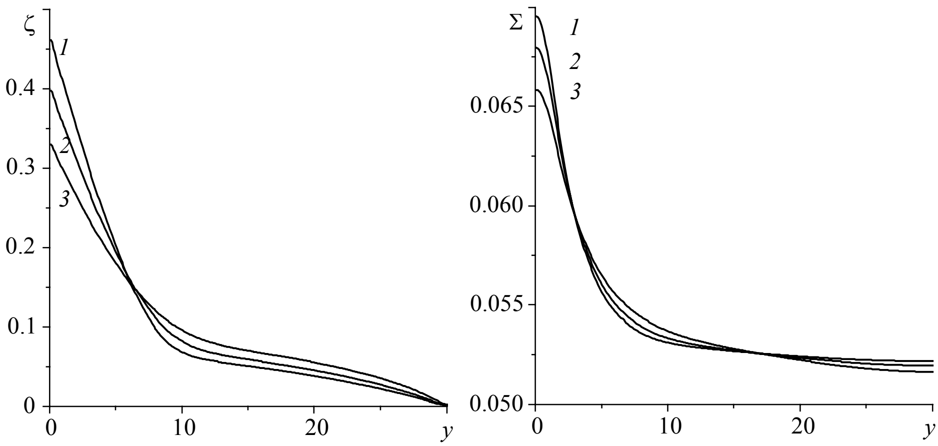


Рис. 4. Профили поверхностной (слева) и объемной (справа) концентрации при $Ma_\Gamma = 5$. Кр. *1–3* соответствуют $Ma_T = 10, 8, 6$

Fig. 4. Profiles of the surface and volume concentration (left and right side, respectively) at $Ma_\Gamma = 5$. Curves *1–3* correspond to $Ma_T = 10$, 8, and 6

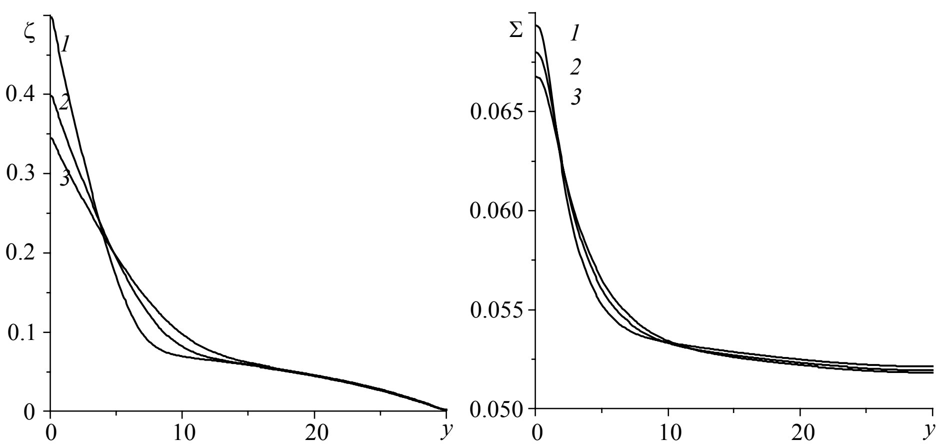


Рис. 5. Профили поверхностной (слева) и объемной (справа) концентрации при $Ma_T = 8$. Кр. *1–3* соответствуют $Ma_\Gamma = 3, 5, 7$

Fig. 5. Profiles of the surface and volume concentration (left and right side, respectively) at $Ma_T = 8$. Curves *1–3* correspond to $Ma_\Gamma = 3$, 5, and 7

На рис. 4 – 6 продемонстрирована роль главных механизмов (термо- и концентрационно-капиллярного) в формировании профилей поверхностной и объемной концентрации, а также скорость движения поверхностного компонента. Видно, что рост теплового числа Марангони Ma_T (что соответствует усилению термокапиллярного механизма) приводит к увеличению перепада концентрации на торцах. В то время как увеличение концентрационного числа Марангони Ma_Γ (отвечает за концентрационно-капиллярный механизм) дает обратный эффект.

Аналогичное поведение отражается на профилях скорости. Рис. 6 показывает, что сначала элемент жидкости постепенно разгоняется термокапиллярной силой вдоль поверхности, затем скорость выходит на практически установившееся значение, а в конце при достижении торца довольно быстро останавливается. Отметим, что подобное поведение довольно типично для термокапиллярной конвекции. Распределение скорости вдоль поверхности подтверждает результаты [6]. А именно, термокапиллярная сила генерирует опускное течение на свободной поверхности, в то время как концентрационно-капиллярный механизм является скорее вторичным. Действуя в противоположном направлении, концентрационно-капиллярная сила вносит существенный позитивный вклад в распределение концентрации в объеме, делая его менее градиентным. Распределение приобретает более гладкий, «барометрический» вид, что хорошо согласуется с опытом.

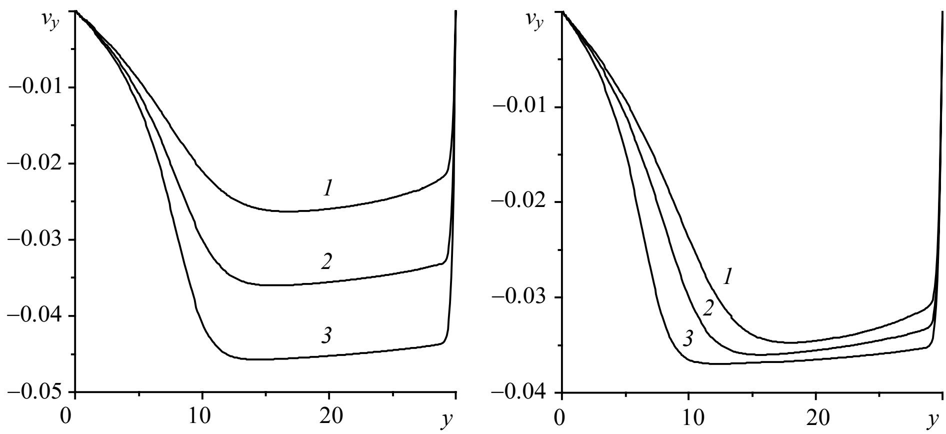


Рис. 6. Продольная компонента скорости на поверхности капилляра. Слева: $Ma_\Gamma = 5$. Кр. *1–3* соответствуют $Ma_T = 6, 8, 10$. Справа: $Ma_T = 8$. Кр. *1–3* отвечают $Ma_\Gamma = 7, 5, 3$

Fig. 6. Longitudinal velocity component on the surface of the capillary. Left side: $Ma_\Gamma = 5$. The curves *1–3* correspond to $Ma_T = 6, 8, 10$. Right side: $Ma_T = 8$. The curves *1–3* correspond to $Ma_\Gamma = 7, 5, 3$

Пример расчета «концентрационной вилки», иллюстрирующей динамику разделения смеси в зависимости от времени, приведен на рис. 7. Полученный результат качественно и количественно повторяет подобные зависимости, представленные в [2]. При достижении момента времени порядка 800 безразмерных единиц (1 ч при переходе к размерным единицам) система практически полностью выходит на стационарный режим. Заметим, что окончательный профиль функции тока, а также профиль поверхностной концентрации формируются гораздо быстрее, чем профиль объемной концентрации.

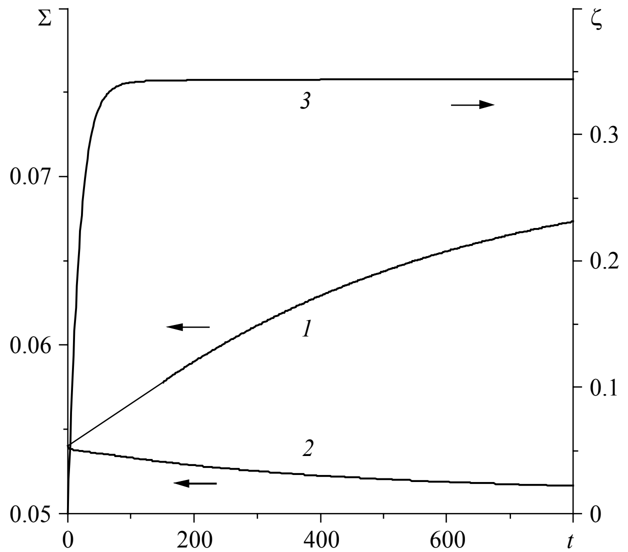


Рис. 7. Максимальное и минимальное значения поля объемной концентрации в зависимости от времени (кр. *1*, *2*) при $Ma_T = 8$ и $Ma_\Gamma = 7$; кр. *3* – максимум поверхностной концентрации в зависимости от времени

Fig. 7. Maximum and minimum values of the volume concentration field as functions of time (*1*, *2*) at $Ma_T = 8$ and $Ma_\Gamma = 7$; maximum of the surface concentration as a function of time (*3*)

Выводы

Результаты прямого численного моделирования показывают, что включение в рассмотрение конвективного переноса, вызываемого поверхностными эффектами, позволяет адекватно описать неожиданно быстрый процесс разделения бинарного расплава на компоненты в тонких капиллярах. Дальнейшее уточнение результатов расчетов упирается в необходимость более точного экспериментального определения управляющих параметров задачи. Это касается значений коэффициентов адсорбции-десорбции для расплавов металлов, коэффициентов поверхностной вязкости и диффузии и т.д. Выяснено, что термокапиллярный механизм является ключевым в формировании пристеночного опускного течения, в то время как вторичный концентрационно-капилярный механизм работает в противоположную сторону: оказывает сильное стабилизирующее действие и размывает тяжелый компонент в объеме вдоль канала. При учете зависимости коэффициента поверхностного натяжения от концентрации исчезает погранслойный характер в распределении тяжелого компонента: он в меньшей степени накапливается вблизи нижнего торца капилляра.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Братухин Ю.К., Макаров С.О.* Гидродинамическая устойчивость межфазных поверхностей. Пермь: Изд-во Пермск. ун-та, 2005. 240 с.
2. *Гаврилин И.В., Фролова Т.Б., Захаров В.П.* О ликвации в жидких эвтектических расплавах // Изв. АН СССР. Металлы. 1984. № 3. С. 191–193.
3. *Гаврилин И.В.* Седиментационный эксперимент при изучении жидких сплавов // Изв. АН СССР. Металлы, 1985. № 2. С. 66–73.
4. *Демин В.А.* Оседание наночастиц в однородной несущей жидкости при наличии термодиффузии // Вестник Пермского университета. Серия: Физика. 2013. Вып. 1 (23). С. 20–24.
5. *Глухов А.Ф., Демин В.А., Третьяков А.В.* О влиянии термодиффузии на перераспределение примеси при остывании столба бинарной жидкости // Изв. Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. 2015. Т. 326. № 11. С. 118–127.
6. *Демин В.А., Петухов М.И.* К вопросу о механизме крупномасштабного переноса компонентов металлических расплавов в неоднородно нагретых тонких капиллярах // Вестник Пермского университета. Серия: Физика. 2016. Вып. 3(34). С. 65–71. DOI: 10.17072/1994-3598-2016-3-65-71.
7. *Slavtchev S., Hennenberg M., Legros J.-C., Lebon G.* Stationary solutal Marangoni instability in a two-layer system // J. Colloid and Interface Science. 1998. V. 203. No. 2. P. 354–368. DOI: 10.1006/jcis.1998.5525.
8. *Гершуни Г.З., Жуховицкий Е.М.* Конвективная устойчивость несжимаемой жидкости. М.: Наука, 1972. 392 с.
9. *Ролдугин В.И.* Физикохимия поверхности: учебник-монография. Долгопрудный: Издательский Дом «Интеллект», 2011. 568 с.
10. *Бирих Р.В.* Устойчивость однородной нестационарной диффузии ПАВ через плоскую границу раздела жидкостей // Вестник Пермского университета. Серия: Физика. 2016. Вып. 1 (32). С. 64–70. DOI: 10.17072/1994-3598-2016-3-64-70.
11. *Birikh R.V., Briskman V.A., Velarde M., Legros J.-C.* Liquid Interfacial Systems: Oscillations and Instability. CRC Press, 2003. 392 p.
12. *Тарунин Е.Л.* Вычислительный эксперимент в задачах свободной конвекции: учеб. пособие. Иркутск: изд-во Иркут. ун-та, 1990. 228 с.

Статья поступила 28.01.2017 г.

Demin V.A., Petukhov M.I. LARGE-SCALE TRANSFER OF MOLTEN METAL COMPONENTS IN THIN CAPILLARIES. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 48. pp. 57–69

DOI 10.17223/19988621/48/6

The results of direct numerical simulation of the concentration-induced convection have been presented in this paper. A binary melt of the liquid metals filling a vertical thin capillary with a non-uniform temperature distribution on the boundaries has been considered. It is assumed that the absolute nonwetting condition takes place on the sidewalls of a channel. This effect gives rise to a free surface on the vertical boundaries where the thermocapillary force occurs due to the external longitudinal temperature gradient, which provides the motion of the liquid elements at a long distance compared with an axial size of the capillary. The adsorption-desorption processes occurring along the surface, thermocapillary force, convective motion in a volume, and diffusion are all characterized by essentially different characteristic time. These mechanisms generate both the large-scale process of circulation with a motion of admixture on the surface at the hot top of the capillary with the following transfer down along the boundary due to the thermocapillary force, and the final return into the volume as a consequence of desorption at the bottom of the capillary. The numerical calculations have been performed using the PGU-Tesla supercomputer of the Research Academic Center “Parallel and Distributed Calculations” at Perm State National Research University. The finite difference method has been applied. The numerical code has been written with the use of Fortran-90 programming language. The calculation results show that the lifting speed of the motion back into the volume is less than that on the surface. Therefore, the admixture at the stage of saturation can be accumulated near the bottom of the capillary. The steady-state flow is stationary and it is determined as in the volume as on the surface predominantly by the Marangoni number. Intensity of the motion and adsorption-desorption processes on the free boundary effect essentially on the formation of both the surface and volume concentration fields and the speed of redistribution of components in the volume. Thus, one of the possible mechanisms of longitudinal division of the liquid binary mixtures into components in thin channels has been demonstrated. This modeling can explain the results of some experiments on division of heterogeneous binary metal melts.

Keywords: concentration-induced convection, free surface, thermocapillary effect, adsorption-desorption processes.

DEMIN Vitaliy Anatol'evich (Doctor of Physics and Mathematics, Perm State National Research University, Perm, Russian Federation)
E-mail: demin@psu.ru

PETUKHOV Maksim Ivanovich (Perm State National Research University, Perm, Russian Federation)
E-mail: geniusmaxp@yandex.ru

REFERENCES

1. Bratukhin U.K., Makarov S.O. (2005) *Gidrodinamicheskaya ustoychivost' mezhfaznykh poverkhnostey* [Hydrodynamic stability of interfaces]. Perm: Perm University Press.
2. Gavrilin I.V., Frolova T.B., Zakharov V.P. (1984) *O likvatsii v zhidkih evtekticheskikh splavakh* [On liquidation in liquid eutectic melts]. Russian Metallurgy (Metally). 3. pp. 191–193.
3. Gavrilin I.V. (1985) *Sedimantatsionnyy eksperiment pri izuchenii zhidkikh splavov* [Sedimentation experiment in the study of liquid alloys]. Russian Metallurgy (Metally). 2. pp. 66–73.
4. Demin V.A. (2013) Sedimentation of nanoparticles in a homogeneous carrying fluid in a presence of thermodiffusion. *Bulletin of Perm University. Physics*. 1(23). pp. 20–24.
5. Glukhov A.F., Demin V.A., Tret'aykov A.V. (2015) On thermodiffusion influence on the dopant distribution during the freezing of binary liquid column. *Bulletin of the Tomsk Polytechnic University. Geo Assets Engineering.* 11(326). pp. 118–127.
6. Demin V.A., Petukhov M.I. (2016) On mechanism of large-scale transfer of molten metal components in non-uniformly heated thin capillaries. *Bulletin of Perm University. Physics*. 3(34). pp. 65–71. DOI: 10.17072/1994-3598-2016-3-65-71.
7. Slavtchev S., Hennenberg M., Legros J.C., Lebon G. (1998) Stationary solutal Marangoni instability in a two-layer system. *J. Colloid Interface Sci*. 2 (203). pp. 354–368. DOI: 10.1006/jcis.1998.5525.
8. Gershuni G.Z., Zhukhovitskiy E.M. (1976) *Convective stability of incompressible fluids*. Jerusalem: Keter Publishing House.
9. Roldugin V.I. (2011) *Fizikokhimiya poverkhnosti* [Physics and chemistry of a surface]. Dolgoprudnyy: Intellect Publishing House.
10. Birikh R.V. (2016) Stability of homogeneous non-stationary surfactant diffusion through a flat interface between liquids. *Bulletin of Perm University. Physics*. 1 (32), pp. 64–70. DOI: 10.17072/1994-3598-2016-3-64-70.
11. Birikh R.V., Briskman V.A., Velarde M., Legros J.C. (2003) *Liquid Interfacial Systems: Oscillations and Instability*. CRC Press.
12. Tarunin E.L. (1990) *Vychislitel'nyy eksperiment v zadachakh svobodnoy konvektsii* [Numerical experiment in problems of free convection]. Irkutsk: Irkutsk University Publ.

УДК 532.5.031
DOI 10.17223/19988621/48/7

А.В. Мерзляков, З.О. Матыева

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О МАЛЫХ ВЫНУЖДЕННЫХ КОЛЕБАНИЯХ ИДЕАЛЬНОЙ ЖИДКОСТИ

Исследование направлено на определение формы свободной поверхности идеальной жидкости, колеблющейся под действием переменного наружного давления в прямоугольном сосуде. Решение задачи проведено в плоской постановке аналитическим путем. Для определения формы свободной поверхности решалось уравнение Лапласа для потенциала скорости идеальной жидкости методом разделения переменных. Полученные результаты сравнивались с имеющимися в настоящее время решениями подобных задач.

Ключевые слова: *идеальная жидкость, потенциал скорости, уравнение Лапласа, метод разделения переменных.*

В настоящее время в практических целях возникает задача о движении жидкости в сосуде (например, колебание топлива в баке автомобиля или ракеты, движение жидкости в автомобильной или железнодорожной цистерне и т.д.). Во многих случаях жидкость можно считать идеальной. Решение задачи о движении идеальной жидкости в сосуде при наличии свободной поверхности является важной технической задачей.

Задача о малых колебаниях идеальной жидкости в ограниченном объеме со свободной поверхностью под действием силы тяжести многократно рассматривалась в различных работах. Основные результаты аналитических решений этой задачи приведены в работах [1–8]. Есть и иностранные работы по этой теме, например [9–11]. Следует, однако, отметить, что во всех перечисленных работах рассматриваются только свободные колебания жидкости; кроме того, практически во всех перечисленных работах ограничиваются только определением частот колебаний и не приводят динамику изменения формы свободной поверхности. Появление современных компьютеров позволило снять этот недостаток. Сейчас можно аналитически решать задачи на определение формы свободной поверхности и пользоваться вычислительными средствами для реализации полученных результатов. Также кроме свободных колебаний оказалось возможным рассматривать вынужденные колебания идеальной жидкости.

В данной работе рассматривается один из возможных случаев движения идеальной жидкости – колебательное движение под действием переменного наружного давления и силы тяжести. Задача решается аналитически в линейном приближении.

Математическая постановка задачи

Рассмотрим происходящее под действием сил тяжести и переменного наружного давления волновое движение однородной несжимаемой идеальной жидкости, ограниченной снизу и с боков некоторыми неподвижными поверхностями, а сверху свободной поверхностью. Целью работы является определение формы свободной поверхности жидкости в любой момент времени. Движение жидкости начинается тогда, когда имеет место некоторое возмущение жидкости. Пусть возмущение жидкости обусловливается причинами, действующими исключительно на ее свободную поверхность. Движение идеальной несжимаемой жидкости в плоском случае описывается уравнениями Эйлера (см. [12]):

$$\frac{dv_x}{dt} = X - \frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial x},$$
$$\frac{dv_y}{dt} = Y - \frac{1}{\rho}\frac{\partial P}{\partial y},$$
$$\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0,$$

где v_x,и v_y – проекции вектора скорости жидкости на оси декартовой системы координат; X и Y – проекции внешних сил на оси Ox, Oy соответственно; P – давление, ρ – плотность, t – время.

В силу потенциальности движения идеальной жидкости можно ввести потенциал скорости жидкости u, для которого $\vec{v} = \nabla u$. Тогда вместо уравнений Эйлера для описания движения жидкости можно использовать уравнение Лапласа для потенциала u:

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0. \quad (1)$$

Граничными условиями для него являются:

- на твердой стенке – условие непротекания:

$$\frac{\partial u}{\partial n} = 0 \ \ (n \text{ – направление нормали к границе});$$

- на свободной поверхности – интеграл Коши – Лагранжа:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{v_x^2 + v_y^2}{2} + \frac{P}{\rho} + \Pi = f(t)\,,$$

где П – потенциал внешних сил, действующих на жидкость, $f(t)$ – произвольная функция времени.

Рассмотрим движение идеальной жидкости в прямоугольном сосуде шириной a и высотой h (см. рис. 1)

Движение жидкости будет определяться путем решения уравнение Лапласа (1) для потенциала скорости в области, занятой жидкостью внутри сосуда. Граничными условиями для него являются:

- на твердых границах Γ_1 и Γ_3 – условия непротекания $\frac{\partial u}{\partial x} = 0$;

- на твердой границе Γ_2 – условие непротекания $\frac{\partial u}{\partial y} = 0$.

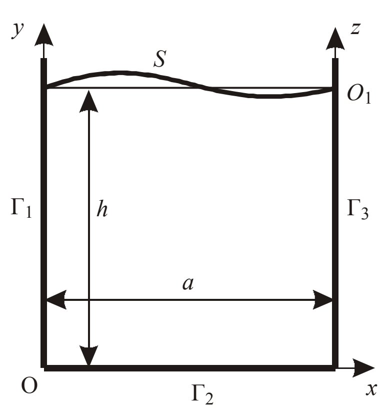


Рис. 1. Расчетная область задачи
Fig. 1. Computational domain of the problem

На свободной поверхности в качестве граничного условия ставится интеграл Коши – Лагранжа со следующими дополнениями. Единственной массовой силой, действующей на жидкость, является сила тяжести. Если ввести величину z – отклонение точки свободной поверхности от равновесного положения (соответствующая координата представлена на рис. 1), то потенциал силы тяжести, действующей на единицу массы, определяется формулой $\Pi = gz$.

При решении поставленной задачи предполагается, что отклонение свободной поверхности жидкости от положения равновесия настолько мало, что область, занятая жидкостью, сохраняет прямоугольную форму. Из-за этого в формуле можно пренебречь квадратами скоростей. Считается, что давление над поверхностью жидкости P является некоторой функцией времени t и координаты x. Произвольную функцию $f(t)$ можно сделать равной 0. Поэтому граничное условие на свободной поверхности примет следующий вид:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{P(x,t)}{\rho} + gz = 0\,. \tag{2}$$

В качестве начальных условий задачи задаются начальная форма свободной поверхности и начальная скорость точек свободной поверхности. Начальная форма свободной поверхности в рассматриваемой задаче считается равновесной, т.е.

$$z(0,x) = 0.$$

Начальная скорость точек свободной поверхности жидкости считается равной нулю, т.е.

$$\left.\frac{\partial u}{\partial y}\right|_{y=h,t=0} = \left.\frac{\partial u}{\partial z}\right|_{z=0,t=0} = 0\,.$$

Метод решения

Уравнение Лапласа (1) решается методом разделения переменных (см. [13]), согласно которому потенциал вектора скорости представляется в виде следующего произведения:

$$u = T(t)X(x)Y(y)\,,$$

где $T(t)$ – функция, зависящая только от времени, $X(x)$ – функция, зависящая только от координаты x, $Y(y)$ – функция, зависящая только от координаты y.

После подстановки этого произведения в уравнение (1) имеем

$$TX''Y + TXY'' = 0\,.$$

Деление этого уравнения на произведение TXY приводит его к следующему виду:

$$\frac{X''}{X} = -\frac{Y''}{Y} = -\lambda^2\,,$$

где λ^2 – некоторое положительное число.

Из данного равенства получаются дифференциальные уравнения для определения функций X и Y.

Уравнение для X – задача Штурма – Лиувилля – сводится к следующему:

$$X'' + \lambda^2 X = 0\,.$$

Решение данного уравнения выглядит так:

$$X = A\cos(\lambda x) + B\sin(\lambda x).$$

Постоянные A и B определяются из граничных условий, которые заданы на границах Γ_1 и Γ_3. Согласно им,

$$\left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x=0} = X'(0) = 0\ ;\ \left.\frac{\partial u}{\partial x}\right|_{x=a} = X'(a) = 0\ .$$

Из первого условия следует $B = 0$; из второго условия

$$\lambda_n = \frac{\pi n}{a},$$

где n – целое число. Поэтому выражение для функции X – собственная функция задачи Штурма – Лиувилля – выглядит так:

$$X_n = \cos\left(\frac{\pi n}{a}x\right).$$

Уравнение для Y сводится к следующему:

$$Y'' - \lambda^2 Y = 0$$

Решение данного уравнения имеет вид

$$Y = A\,\mathrm{ch}(\lambda y) + B\,\mathrm{sh}(\lambda y).$$

Согласно граничному условию на границе Γ_2,

$$\left.\frac{\partial u}{\partial y}\right|_{y=0} = Y'(0) = 0\ .$$

Из этого условия следует $B = 0$. Поэтому выражение для функции Y

$$Y_n = \mathrm{ch}(\lambda_n y) = \mathrm{ch}\left(\frac{\pi n}{a}y\right).$$

Таким образом, для произвольно заданного натурального номера n решение уравнения Лапласа будет выглядеть так:

$$u_n = T_n(t)\,\mathrm{ch}\left(\frac{\pi n}{a}y\right)\cos\left(\frac{\pi n}{a}x\right),$$

а общее решение – так:

$$u = \sum_{n=0}^{\infty} T_n(t)\,\mathrm{ch}\left(\frac{\pi n}{a}y\right)\cos\left(\frac{\pi n}{a}x\right). \tag{3}$$

Для поиска функций $T(t)$ необходимо использовать граничное условие на свободной поверхности, которое нужно продифференцировать по времени и учесть, что $\frac{\partial z}{\partial t} = v_y = \frac{\partial u}{\partial y}$. Тогда выражение (2) после небольшого преобразования примет вид

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} + g\left.\frac{\partial u}{\partial y}\right|_{y=h} = -\frac{1}{\rho}\cdot\frac{\partial P}{\partial t} = Q(x,t)\ .$$

Подстановка выражения для потенциала в это равенство и разложение в ряд Фурье правой части по собственным функциям задачи Штурма – Лиувилля приводит к следующему выражению:

$$\sum_{n=0}^{\infty} T_n'' \operatorname{ch}\left(\frac{\pi n}{a}h\right)\cos\left(\frac{\pi n}{a}x\right) + g\sum_{n=0}^{\infty} T_n \frac{\pi n}{a}\operatorname{sh}\left(\frac{\pi n}{a}h\right)\cos\left(\frac{\pi n}{a}x\right) = \sum_{n=0}^{\infty} Q_n(t)\cos\left(\frac{\pi n}{a}x\right).$$

После перенесения всех слагаемых в одну сторону, группировки и вынесения общих множителей имеем

$$\sum_{n=0}^{\infty}\left\{T_n''\operatorname{ch}\left(\frac{\pi n}{a}h\right) + gT_n\frac{\pi n}{a}\operatorname{sh}\left(\frac{\pi n}{a}h\right) - Q_n(t)\right\}\cos\left(\frac{\pi n}{a}x\right) = 0 .$$

Данная сумма будет равна нулю, когда каждая фигурная скобка будет равна нулю. Это приводит к следующей системе уравнений для определения функций T_n:

$$T_n''\operatorname{ch}\left(\frac{\pi n}{a}h\right) + gT_n\frac{\pi n}{a}\operatorname{sh}\left(\frac{\pi n}{a}h\right) - Q_n(t) = 0 .$$

Небольшое преобразование и введение новых обозначений приводят систему к виду

$n = 0, \qquad T_0'' = Q_0(t);$

$n > 0, \qquad T_n'' + \omega_n^2 T_n = F_n(t),$

где $\omega_n^2 = g\frac{\pi n}{a}\operatorname{th}\left(\frac{\pi n}{a}h\right)$; $F_n(t) = \dfrac{Q_n(t)}{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi n}{a}h\right)}$.

Процедура решения уравнений проводится согласно методике, приведенной в работе [13]. Эта методика основана на том, что решение уравнения ищется в виде суммы общего решения однородного уравнения и частного решения неоднородного. Общее решение однородного уравнения соответствует свободным колебаниям жидкости и рассматриваться не будет, так как начальное состояние жидкости – равновесие, поэтому свободные колебания отсутствуют. Частное решение, соответствующее вынужденным колебаниям, определяется по формуле

$$T_n(t) = \int_0^t f_n(t-\tau)F_n(\tau)\,d\tau , \tag{4}$$

где $f_n(t)$ – решение соответствующего однородного уравнения при следующих начальных условиях:

$$f_n(0) = 0;\ f_n'(0) = 1 .$$

Для $n = 0$ выражение (4) приобретает вид

$$T_0(t) = \int_0^t (t-\tau)Q_0(\tau)\,d\tau ,$$

а для случая $n > 0$ выражение (4)

$$T_n(t) = \frac{1}{\omega_n}\int_0^t \sin\left(\omega_n(t-\tau)\right)F_n(\tau)\,d\tau .$$

Вычисление полученных интегралов и подстановка их в формулу для потенциала (3) дает окончательный вид решения уравнения Лапласа. Опираясь на это решение, можно получить выражение для формы свободной поверхности жидкости через отклонение z от состояния равновесия. Это выражение вытекает из формулы для граничного условия (2):

$$z = -\frac{1}{g}\left(\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{P(x,t)}{\rho}\right). \qquad (5)$$

Результаты проверки метода

1. Вынужденные колебания идеальной жидкости под действием гармонически меняющегося давления

В данной части работы рассматривается вынужденное колебание идеальной жидкости под действием переменного наружного давления, которое описывается выражением

$$\frac{P(x,t)}{\rho} = P_0 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\sin(\omega_0 t),$$

где P_0 – отношение амплитудного значения наружного давления к плотности жидкости, ω_0 – частота колебаний наружного давления.

Как указано выше,

$$Q(x,t) = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = -P_0\omega_0 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\cos(\omega_0 t).$$

Разложение в ряд Фурье по собственным функциям задачи Штурма – Лиувилля дает выражения для коэффициентов Q_n:

$$Q_n(t) = \frac{2}{a}\int_0^a \left(-P_0\omega_0 \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)\cos(\omega_0 t)\right)\cos\left(\frac{\pi n}{a}x\right)dx.$$

Окончательно формулы для коэффициентов выглядят так:

a) $n = 0$: $$Q_0(t) = -\frac{2P_0\omega_0\cos(\omega_0 t)}{\pi};$$

b) $n = 1$: $$Q_1(t) = 0;$$

c) $n > 1$: $$Q_n(t) = 2P_0\omega_0 \frac{(-1)^n + 1}{\pi\left(n^2 - 1\right)}\cos(\omega_0 t) = G_n\cos(\omega_0 t),$$

где $G_n = 2P_0\omega_0 \dfrac{(-1)^n + 1}{\pi\left(n^2 - 1\right)}$.

Согласно изложенной выше методике, получаются выражения для T_n:

a) $n = 0$: $$T_0(t) = \int_0^t (t-\tau)Q_0(\tau)\,d\tau = -\frac{2P_0}{\pi\omega_0}\left(1 - \cos(\omega_0 t)\right);$$

b) $n = 1$: $$T_1(t) = 0;$$

c) $n > 1$

$$T_n(t) = \frac{1}{\omega_n}\int_0^t \sin(\omega_n(t-\tau))\frac{Q_n(\tau)}{ch\left(\frac{\pi n}{a}h\right)}d\tau =$$

$$= \frac{G_n}{ch\left(\frac{\pi n}{a}h\right)}\frac{\cos(\omega_0 t)-\cos(\omega_n t)}{\omega_n^2-\omega_0^2}.$$

Окончательное выражение для потенциала скорости жидкости

$$u = -\frac{2P_0}{\pi\omega_0}(1-\cos(\omega_0 t)) + \sum_{n=2}^{\infty}\frac{G_n}{\mathrm{ch}\left(\frac{\pi n h}{a}\right)}\frac{\cos(\omega_0 t)-\cos(\omega_n t)}{\omega_n^2-\omega_0^2}\mathrm{ch}\left(\frac{\pi n}{a}y\right)\cos\left(\frac{\pi n}{a}x\right).$$

Подстановка в (5) дает выражение для определения отклонения свободной поверхности z от состояния равновесия:

$$z = -\frac{1}{g}\left(P_0\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\sin(\omega_0 t) - \frac{2P_0}{\pi}\sin(\omega_0 t) + \sum_{n=2}^{\infty}G_n\frac{\omega_n\sin(\omega_n t)-\omega_0\sin(\omega_0 t)}{\omega_n^2-\omega_0^2}\cos\left(\frac{\pi n}{a}x\right)\right).$$

По приведенной формуле был проведен расчет формы свободной поверхности идеальной жидкости с помощью программы Mathcad. Размеры сосуда: ширина $a = 1$ м, глубина $h = 1$ м. Плотность жидкости было взята 1000 кг/м^3. Амплитудное значение давления 100 Па. Период колебаний вынуждающего давления составляет $T_0 = 2.1$ с.

На рис. 2 приведена форма свободной поверхности жидкости в разные моменты времени, соответствующие началу колебаний, четверти периода, трем четвертям периода и первому периоду колебаний вынуждающего давления. Величина z указана в метрах.

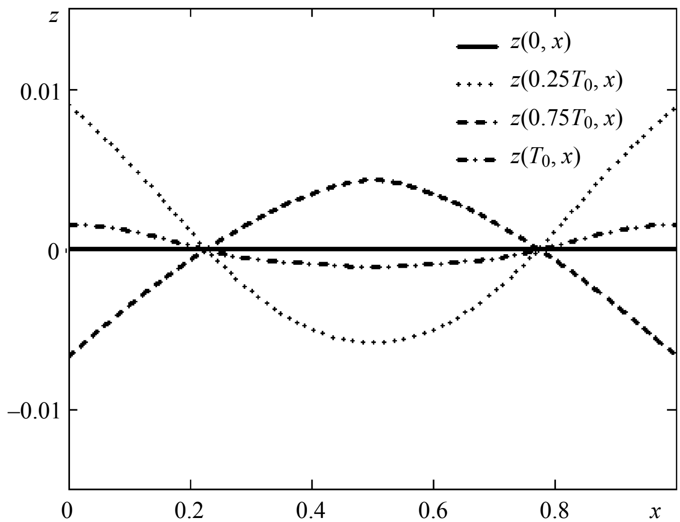


Рис. 2. Форма свободной поверхности жидкости для непрерывно меняющегося внешнего давления
Fig. 2. Shape of the free surface of liquid in the case of external pressure varying continuously

2. Вынужденные колебания идеальной жидкости под действием импульса давления на свободной поверхности

Вынужденные колебания идеальной жидкости происходят под действием импульса наружного давления на свободной поверхности, который описывается следующим выражением:

$$\frac{P(x,t)}{\rho} = P_0 \sin\left(\frac{\pi(x-b)}{c-b}\right)\sin\left(\frac{\pi t}{T}\right) \text{ при } b \le x \le c,\ t \le T,$$

$$\frac{P(x,t)}{\rho} = 0 \text{ – в остальных случаях.}$$

Здесь b и c – границы зоны действия импульса давления, T – его длительность.

Отличие этого случая от предыдущего заключается в реализации граничного условия на свободной поверхности. По аналогии с предыдущей частью, можно получить выражение для функции Q:

$$Q(x,t) = -\frac{P_0\pi}{T}\sin\left(\frac{\pi(x-b)}{c-b}\right)\cos\left(\frac{\pi t}{T}\right) \text{ при } b \le x \le c,\ t \le T,$$

$$Q(x,t) = 0 \text{ – в остальных случаях.}$$

Так же, как и ранее, необходимо эту функцию разложить в ряд Фурье по собственным функциям задачи Штурма – Лиувилля. При разложении необходимо иметь в виду, что во время действия импульса интеграл достаточно вычислять только по интервалу его действия, а после окончания действия импульса функция $Q = 0$. Поэтому коэффициенты разложения принимают вид

$$Q_n(t) = \frac{2}{a}\int_b^c\left(-\frac{P_0\pi}{T}\sin\left(\frac{\pi(x-b)}{c-b}\right)\cos\left(\frac{\pi t}{T}\right)\right)\cos\left(\frac{\pi n}{a}x\right)dx = -\frac{P_0\pi}{T}q_n\cos\left(\frac{\pi t}{T}\right)$$

при $t \le T$,

$$Q_n(t) = 0 \text{ – в остальных случаях.}$$

Для экономии места здесь введено обозначение вычисленного интеграла:

$$q_n = \frac{4a(c-b)\cos\left(\frac{\pi n(c-b)}{2a}\right)\cos\left(\frac{\pi n(c+b)}{2a}\right)}{\pi\cdot\left(a^2 - n^2(c-b)^2\right)}.$$

При реализации формулы (4) необходимо иметь в виду, что частные решения отличаются в зависимости от того, как соотносится временной промежуток интегрирования t и время действия импульса T. Поэтому

при $t \le T$:

$$T_0(t) = \int_0^t (t-\tau)Q_0(\tau)\,d\tau = -\frac{2P_0T(c-b)}{a\pi^2}\left(1-\cos\left(\frac{\pi t}{T}\right)\right),$$

$$T_n(t) = \frac{1}{\omega_n}\int_0^t \sin(\omega_n(t-\tau))\frac{Q_n(t)}{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi n}{a}h\right)}d\tau = -\frac{\pi P_0 q_n T\left(\cos\left(\frac{\pi t}{T}\right)-\cos(\omega_n t)\right)}{\left((\omega_n T)^2-\pi^2\right)\operatorname{ch}\left(\frac{\pi n}{a}h\right)};$$

при $t > T$:

$$T_0(t) = \int_0^T (t-\tau) Q_0(\tau)\, d\tau = -\frac{4P_0 T (c-b)}{a\pi^2},$$

$$T_n(t) = \frac{1}{\omega_n} \int_0^T \sin(\omega_n (t-\tau)) \frac{Q_n(\tau)}{\mathrm{ch}\left(\frac{\pi n}{a} h\right)} d\tau = \frac{\pi P_0 q_n T (\cos(\omega_n (T-t)) + \cos(\omega_n t))}{\left((\omega_n T)^2 - \pi^2\right) \mathrm{ch}\left(\frac{\pi n}{a} h\right)}.$$

Таким образом, общий вид потенциала следующий:

$t \le T$:

$$u = -\frac{2P_0 T (c-b)}{a\pi^2}\left(1 - \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right)\right) +$$

$$+\pi P_0 T \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q_n \left(\cos(\omega_n t) - \cos\left(\frac{\pi t}{T}\right)\right)}{\left((\omega_n T)^2 - \pi^2\right) \mathrm{ch}\left(\frac{\pi n}{a} h\right)} \mathrm{ch}\left(\frac{\pi n}{a} y\right) \cos\left(\frac{\pi n}{a} x\right);$$

$t > T$:

$$u = -\frac{4P_0 T (c-b)}{a\pi^2} + \pi P_0 T \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q_n (\cos(\omega_n (T-t)) + \cos(\omega_n t))}{\left((\omega_n T)^2 - \pi^2\right) \mathrm{ch}\left(\frac{\pi n}{a} h\right)} \mathrm{ch}\left(\frac{\pi n}{a} y\right) \cos\left(\frac{\pi n}{a} x\right).$$

Подстановка в (5) дает выражение для определения отклонения свободной поверхности z от состояния равновесия:

$t \le T$:

$$z = -\frac{P_0}{g} \sin\left(\left(\frac{\pi(x-b)}{c-b}\right) \sin\left(\frac{\pi t}{T}\right) - \frac{2(c-b)}{a\pi} \sin\left(\frac{\pi t}{T}\right) + \right.$$

$$\left. + \pi T \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q_n \left(\frac{\pi}{T} \sin\left(\frac{\pi t}{T}\right) - \omega_n \sin(\omega_n t)\right)}{\left((\omega_n T)^2 - \pi^2\right)} \cos\left(\frac{\pi n}{a} x\right)\right);$$

$t > T$:

$$z = \frac{\pi P_0 T}{g} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{q_n \omega_n (\sin(\omega_n (T-t)) + \sin(\omega_n t))}{\left((\omega_n T)^2 - \pi^2\right)} \cos\left(\frac{\pi n}{a} x\right).$$

По приведенным формулам был проведен расчет формы свободной поверхности идеальной жидкости с помощью программы Mathcad. Плотность жидкости было взята 1000 кг/м^3. Размеры сосуда: ширина – 1 м, глубина – 0.5 м. Максимальное значение давления в импульсе 100 Па. Длительность импульса составляет 0.1 с. Границы действия импульса 0.44 и 0.56 м от левой границы сосуда.

На рис. 3 приведена форма свободной поверхности жидкости в разные моменты времени: *а* – начало импульса, *б* – окончание действия импульса, *в* – формирование волны на поверхности, *г* – достижение волной границы сосуда. Расчеты показывают четкий момент отражения волн от стенок и последующее наложение колебаний с образованием сложной волновой поверхности.

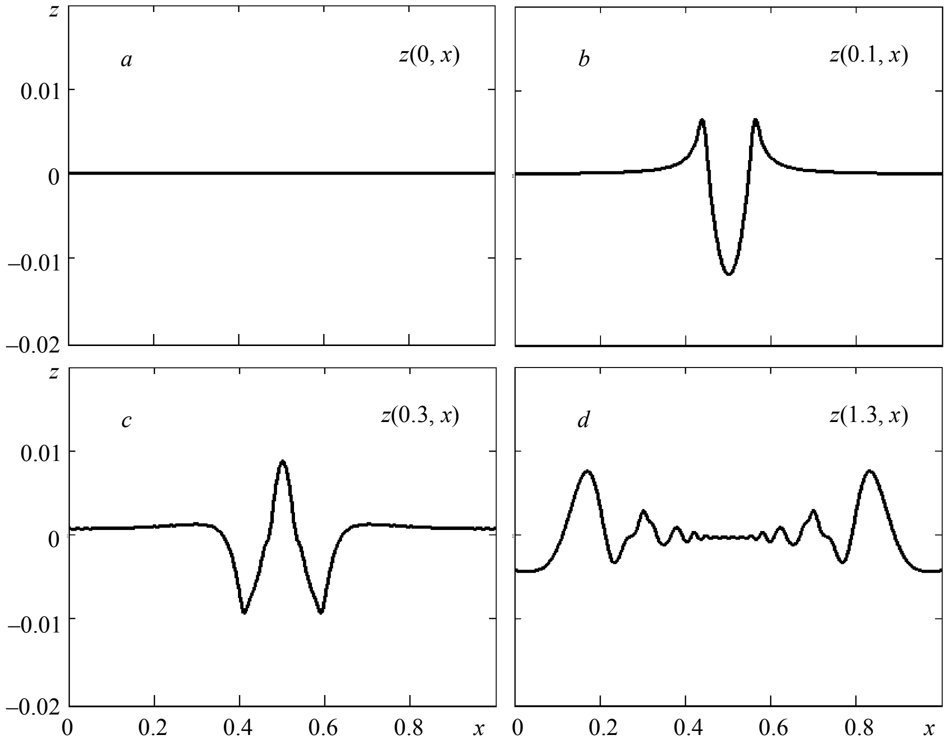


Рис. 3. Форма свободной поверхности жидкости для импульсного внешнего давления
Fig. 3. Shape of the free surface of liquid in the case of impulsive external pressure

Таким образом, предложенная методика дает возможность построить форму свободной поверхности идеальной жидкости при ее вынужденных движениях в ограниченном сосуде под действием переменного давления на поверхности жидкости.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Богоряд И.Б.*, *Дружинин И.А.*, *Дружинина Г.З.*, *Либин Э.Е.* Введение в динамику сосудов с жидкостью. Томск. Изд-во Том. ун-та, 1977. 143 с.
2. *Моисеев Н.Н.* О колебаниях тяжелой идеальной несжимаемой жидкости в сосуде // ДАН СССР. 1952. Т. 85. Вып. 5. С. 963–965.
3. *Моисеев Н.Н.*, *Черноусько Ф.Л.* Задачи колебаний жидкости, подверженной силам поверхностного натяжения // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1965. Т. 5. № 6. С. 1071–1095.
4. *Петров А.А.* Приближенный метод расчета собственных колебаний жидкости в сосудах произвольной формы и потенциалов Жуковского для этих сосудов // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1963. Т. 3. № 5. С. 958–964.
5. *Петров А.А.*, *Попов Ю.П.*, *Пухначев Ю.В.* Вычисление собственных колебаний жидкости в неподвижных сосудах вариационным методом // Журнал вычислительной математики и математической физики. 1964. Т. 4. № 5. С. 880–895.
6. *Балабух Л.И.*, *Молчанов А.Г.* Осесимметричные колебания сферической оболочки, частично заполненной жидкостью // Изв. АН СССР. Механика твердого тела. 1967. № 5. С. 22–26.
7. *Пожалостин А.А.* Свободные колебания жидкости в жестком круговом цилиндрическом сосуде // Изв. вузов. Авиационная техника. 1963. № 3. С. 25–32.

8. *Сретенский Л.Н.* Теория волновых движений жидкости. М.: Наука, 1977. 816 с.
9. *Linton C.M.*, *McIver P.* Embedded trapped modes in water waves and acoustics // Wave Motion. 2007. V. 45. – No. 7–8. P. 940–951.
10. *Motygin O.V.* On trapping of surface water waves by cylindrical bodies in a channel // Wave Motion. 2008. V. 45. P. 940–951
11. *Huang D.*, *Guo W. and Li X.* An analytical solution of fluid–structure coupling oscillation in one-dimensional ideal condition under small disturbance // J. Sound and Vibration. 2002. V. 255. No. 3. P. 610–614
12. *Кочин Н.Е.*, *Кибель И.А.*, *Розе Н.В.* Теоретическая гидромеханика. Ч. 1. М.: ГИФМЛ, 1963. 584 с.
13. *Тихонов А.Н.*, *Самарский А.А.* Уравнения математической физики. М.: Наука, 1977. 742 с.

Статья поступила 23.01.2017 г.

Merzlyakov A.V., *Matyeva Z.O.* ANALYTICAL SOLUTION OF THE PROBLEM OF SMALL FORCED OSCILLATIONS OF THE IDEAL FLUID. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics.* 48. pp. 70–81

DOI 10.17223/19988621/48/7

The study aims to determine the shape of the free surface of an ideal liquid vibrating under variable external pressure in a rectangular vessel. The two-dimensional problem has been solved analytically. The motion of the ideal fluid has been simulated by the solution of Laplace's equation for the fluid velocity potential in the flow region. On the solid boundary, the impermeability conditions have been assigned; on the free surface, the Cauchy–Lagrange integral. The equation was solved using the variable separation method. The free surface condition has been transformed in the case of small oscillations and varying pressure on the free surface and it has been used to determine the velocity potential as a function of time. The implementation of this condition required solving the system of linear second-order differential equations. The same condition gives the formula for determining the shape of the free surface of liquid at any time instant in the form of deviation of free surface points from the equilibrium position. The method described in this paper has been applied in the cases with the external pressure varying harmonically and acting on the restricted part of the free surface during a limited time. The obtained results have been compared with the currently available solutions of similar problems.

Keywords: ideal fluid, velocity potential, Laplace's equation, method of separation of variables.

MERZLYAKOV Aleksandr Vladimirovich (Candidate of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation)
E-mail: amerz@mail.ru

MATYEVA Zarina Olegovna (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation)
E-mail: amerz@sibmail.com

REFERENCES

1. Bogoryad I.B., Druzhinin I.A., Druzhinina G.Z., Libin E.E. (1977) *Vvedenie v dinamiku sosudov s zhidkost'yu* [Introduction to dynamics of vessels with a liquid]. Tomsk: TSU Publ. P.143.
2. Moiseev N.N. (1952) *O kolebaniyakh tyazheloy ideal'noy neszhimaemoy zhidkosti v sosude* [On oscillations of a heavy ideal incompressible fluid in a vessel]. DAN SSSR. 5(85). pp. 963–965.
3. Moiseev N.N., Chernous'ko F.L. (1965) Problems on the oscillation of a fluid subject to surface tension forces. *USSR Comput. Math. & Math. Phys*. 6(5). pp. 128–160. DOI: 10.1016/0041-5553(65)90102-3.

4. Petrov A.A. (1963) An approximate method for the calculation of characteristic oscillations of a liquid in vessels of arbitrary shape and the Zhukovskii potentials for these vessels. *USSR Comput. Math. & Math. Phys.* 5(3). pp. 1307–1316. DOI: 10.1016/0041-5553(63)90116-2.
5. Petrov A.A., Popov Yu.P. Pukhnachev Yu.V. (1964) Evaluation of the proper vibrations of a fluid in a fixed vessel by the variational method. *USSR Comput. Math. & Math. Phys.* 5(4). pp. 880–895. DOI: 10.1016/0041-5553(64)90144-2.
6. Balabukh L.I., Molchanov A.G. (1967) Osesimmetrichnye kolebaniya sfericheskoy obolochki, chastichno zapolnennoy zhidkost'yu [Axisymmetric oscillations of a spherical shell partially filled with a liquid]. *Izvestiya AN SSSR. Mekhanika tverdogo tela*. 5. pp. 22–26.
7. Pozhalostin A.A. (1963) Svobodnye kolebaniya zhidkosti v zhestkom krugovom tsilindricheskom sosude [Free oscillations of a liquid in a rigid circular cylindrical vessel]. *Izvestiya visshikh uchebnykh zavedeniy. Aviatsionnaya tekhnika*. 3. pp. 25–32.
8. Sretenskiy L.N. (1977) *Teoriya volnovykh dvizheniy zhidkosti* [Theory of wave motions in a fluid]. Moscow: Nauka.
9. Linton C.M., McIver P. (2007) Embedded trapped modes in water waves and acoustics. *Wave Motion*. 45. pp. 16–29.
10. Motygin O.V. (2007) On trapping of surface water waves by cylindrical bodies in a channel. *Wave Motion*. 45(7-8). pp. 940–951. DOI: 10.1016/j.wavemoti.2007.04.009.
11. Huang D., Guo W., Li X. (2002) An analytical solution of fluid–structure coupling oscillation in one-dimensional ideal condition under small disturbance. *Journal of Sound and Vibration*. 255(3). pp. 610–614. DOI:10.1006/jsvi.2002.5193.
12. Kochin N.E., Kibel' I.A., Roze N.V. (1963) *Teoreticheskaya gidromekhanika. Chast' 1* [Theoretical Fluid Mechanics. Part 1]. Moscow: State Edition of Physical and Mathematical Literature.
13. Tikhonov A.N., Samarskiy A.A. (1977) *Uravneniya matematicheskoy fiziki* [Equations of mathematical physics]. Moscow: Nauka.

УДК 536.46
DOI 10.17223/19988621/48/8

К.М. Моисеева, А.Ю. Крайнов, Д.М. Моисеев

УСТОЙЧИВОСТЬ ГОРЕНИЯ ПОЛИДИСПЕРСНОЙ УГЛЕ-МЕТАНО-ВОЗДУШНОЙ СМЕСИ В ГОРЕЛКЕ С РЕКУПЕРАЦИЕЙ ТЕПЛА[1]

Решена задача об устойчивости горения полидисперсной взвеси угольной пыли в метано-воздушной смеси в горелке с рекуперацией тепла. Определена граница устойчивого горения угле-метано-воздушной смеси в зависимости от состава и скорости подачи смеси на входе в горелку. Показано влияние инертных частиц на устойчивость горения смеси.

Ключевые слова: *угле-метано-воздушная смесь, полидисперсная угольная пыль, щелевая горелка, устойчивость горения.*

В настоящей работе решается задача об устойчивости горения угле-метано-воздушной смеси (УМВС) в горелке с рекуперацией тепла. Устойчивость горения в рассматриваемом случае определяется составом смеси и процессом рекуперации тепла и зависит от скорости подачи смеси на вход горелки. Угле-метано-воздушная смесь представляет собой полидисперсную взвесь инертных и реагирующих частиц угольной пыли в метано-воздушной смеси с содержанием метана меньше стехиометрического значения. На устойчивость горения влияет процентное соотношение между инертными и реагирующими частицами, массовая концентрация угольной пыли и метана в смеси, а также размер частиц угольной пыли. В частности, исследования влияния размеров, массовой концентрации частиц, состава смеси на возможность горения и особенности распространения пламени реагирующей газовзвеси выполнены в [1–4].

В работе [1] показано, что смесь реакционноспособного газа с воздухом и угольной пылью способна к взрыву при малых концентрациях угольных частиц в воздухе. При этом аэровзвесь угольной пыли или метано-воздушная смесь по отдельности при взятых концентрациях в воздухе не способны к взрыву. Авторами [2–3] рассмотрено влияние мелкодисперсной фракции угольных частиц на скорость распространения пламени газовзвеси. Показано, что в случае малых начальных концентраций горючего в газе присутствие в газовой смеси реагирующих частиц увеличивает скорость распространения фронта горения. При значениях концентрации горючего в газе, близких к стехиометрическому значению, частицы уменьшают скорость пламени. Выполнено численное исследование горения монодисперсной взвеси угольной пыли в бедной метано-воздушной смеси в горелке с рекуперацией тепла [4]. Показано, что с увеличением радиуса частиц уменьшается максимальное значение скорости подачи газа на входе в горелку, для которого возможно установление устойчивого режима горения.

В настоящей работе приведено численное исследование задачи горения метано-воздушной смеси со взвешенной полидисперсной угольной пылью в щелевой горелке с инертной внутренней вставкой. Постановка задачи основана на физико-математической постановке [4]. Учитывается полидисперсность угольной пыли,

[1] Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ 15-03-02578 а.

полагается, что пыль состоит из инертных и реагирующих частиц. Целью работы является определение условий устойчивого горения угле-метано-воздушной смеси в зависимости от состава и скорости подачи.

Холодная угле-метано-воздушная смесь с массовым содержанием метана $a_{\text{CH4},v}$, общей массовой концентрацией частиц $m_{\text{dust}} = \sum_{i=1..N} m_{\text{dust},i}$ и температурой газовой фазы $T_{g,v}$ подается со скоростью U_v в предварительно разогретую щелевую горелку со стороны $x = 0$. Полагается, что частицы пыли подразделяются на инертные и реагирующие. Общее количество фракций пыли равно N. Прочие допущения математической постановки соответствуют [4]. Математическая постановка задачи имеет следующей вид:

Уравнение энергии для газовой фазы:

$$c_g \rho_g \frac{\partial T_g}{\partial t} + c_g \rho_g u \frac{\partial T_g}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\lambda\left(T_g\right) \frac{\partial T_g}{\partial x} \right) + \frac{\alpha_S}{h}\left(T_{1,S} - T_g\right) +$$

$$\sum_{i=1,\dots,N} \left[G c_k T_{k,i} + \alpha_{k,i} n_{k,i} S_{k,i} \left(T_{k,i} - T_g\right)\right] + Q_1 \rho_g^2 a_{\text{CH4}} a_{\text{O2}} k_{01} \exp\left(-\frac{E_1}{R_u T_g} \right), \qquad (1)$$

$$T_{1,S}(x,t) = \begin{cases} T_S(x,t), & x < L, \\ T_S(2L - x, t), & x \ge L, \end{cases} \quad 0 \le x \le 2L,$$

Уравнение энергии для внутренней перегородки:

$$c_S \rho_S \frac{\partial T_S}{\partial t} = \lambda_S \frac{\partial^2 T_S}{\partial x^2} - \frac{\alpha_S}{h_S}\left(T_S - T_g(x,t)\right) - \frac{\alpha_S}{h_S}\left(T_S - T_g(2L - x, t)\right), \; 0 \le x \le L. \qquad (2)$$

Уравнение энергии для реагирующих частиц i-й фракции:

$$c_k \rho_{k,i} \frac{\partial T_{k,i}}{\partial t} + u c_k \rho_{k,i} \frac{\partial T_{k,i}}{\partial x} = \alpha_{k,i} S_{k,i} n_{k,i} \left(T_g - T_{k,i}\right) + Q_2 G_i - G_i c_k T_{k,i},$$

$$i = 1,\dots,N, \; 0 \le x \le 2L. \qquad (3)$$

Уравнение баланса массы метана в смеси:

$$\frac{\partial a_{\text{CH4}}}{\partial t} + u \frac{\partial a_{\text{CH4}}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D\left(T_g\right) \frac{\partial a_{\text{CH4}}}{\partial x} \right) - k_{01} \rho_g a_{\text{CH4}} a_{\text{O2}} \exp\left(-\frac{E_1}{R_u T_g} \right),$$

$$0 \le x \le 2L. \qquad (4)$$

Уравнение баланса массы окислителя в смеси:

$$\frac{\partial a_{\text{O2}}}{\partial t} + u \frac{\partial a_{\text{O2}}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D\left(T_g\right) \frac{\partial a_{\text{O2}}}{\partial x} \right) - \frac{\mu_{\text{O2}} \nu_{\text{O2}}}{\mu_{\text{CH4}} \nu_{\text{CH4}}} k_{01} \rho_g a_{\text{CH4}} a_{\text{O2}} \exp\left(-\frac{E_1}{R_u T_g} \right) -$$

$$- \frac{\mu_{\text{O2}} \nu_{\text{O2}}}{\mu_{\text{C}} \nu_{\text{C}}} \sum_{i=1,\dots,N} \frac{G_i}{\rho_g}, \quad 0 \le x \le 2L. \qquad (5)$$

Уравнение состояния идеального газа:

$$p = \rho_g R_g T_g = \text{const}. \qquad (6)$$

Уравнение неразрывности для газа:

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial\left(\rho_g u\right)}{\partial x} = \sum_{i=1,\dots,N} G_i. \qquad (7)$$

Уравнение баланса массы частиц i-й фракции:

$$\frac{\partial \rho_{k,i}}{\partial t}+\frac{\partial\left(\rho_{k,i}u\right)}{\partial x}=-G_i,\ i=1,...,N\ . \quad (8)$$

Уравнение счетной концентрации частиц i-й фракции:

$$\frac{\partial n_{k,i}}{\partial t}+\frac{\partial n_{k,i}\,u}{\partial r}=0,\ i=1,...,N\ . \quad (9)$$

Уравнение изменения радиуса частиц i-й фракции:

$$r_{k,i}=\sqrt[3]{\frac{3\rho_{k,i}}{4\pi\rho_{k,i}^0\,n_{k,i}}},\ i=1,...,N\ . \quad (10)$$

Начальные условия:

$$\begin{gathered}T_g\left(x,0\right)=T_{g,b}(x),\ T_S\left(x,0\right)=T_{S,b}(x),\ T_{k,i}\left(x,0\right)=T_{k,b}(x),\\ \rho_{k,i}\left(x,0\right)=\rho_{k,b}(x),\ a_{\mathrm{CH4}}\left(x,0\right)=a_{\mathrm{CH4},b}(x),\ a_{\mathrm{O2}}\left(x,0\right)=a_{\mathrm{O2},b}(x),\\ u\left(x,0\right)=u_{g,b}(x),\ n_{k,i}\left(x,0\right)=n_{k,b}(x).\end{gathered} \quad (11)$$

Граничные условия:

$$\begin{gathered}T_g\left(0,t\right)=T_{g,v},\ T_{k,i}\left(0,t\right)=T_{k,v},\ a_{\mathrm{CH4}}\left(0,t\right)=a_{\mathrm{CH4},v},\ \ a_{O2}\left(0,t\right)=a_{\mathrm{O2},v},\\ u\left(0,t\right)=u_v,\ \rho_{k,i}\left(0,t\right)=\rho_{k,v},\ \ n_{k,i}\left(0,t\right)=\frac{\rho_{k,v}}{V_{k,i}\,\rho_k^0},\ \ \frac{\partial T_S\left(0,t\right)}{\partial x}=0;\end{gathered} \quad (12)$$

$$\frac{\partial T_S\left(L,t\right)}{\partial x}=0; \quad (13)$$

$$\frac{\partial T_g\left(2L,t\right)}{\partial x}=\frac{\partial a_{\mathrm{CH4}}\left(2L,t\right)}{\partial x}=\frac{\partial a_{\mathrm{O2}}\left(2L,t\right)}{\partial x}=0\ . \quad (14)$$

В постановке задачи использованы следующие обозначения: T – температура; c – теплоемкость; n – количество частиц в единице объема; R_u – универсальная газовая постоянная; R_g – газовая постоянная; r – радиус; S – площадь; Q – тепловой эффект реакции; E – энергия активации; k_0 – предъэкспонент в законе Аррениуса; ρ – плотность; ρ_k^0 – плотность угольной частицы; a_{O2} – массовая концентрация окислителя в смеси; a_{CH4} – массовая концентрация горючего в смеси; μ_{CH4} – молярная масса метана; μ_{O2} – молярная масса кислорода; μ_{C} – молярная масса углерода; u – скорость; h – ширина канала горелки; h_S – ширина внутренней вставки, ν_{CH4} – количество молей метана в реакции; ν_{O2} – количество молей кислорода в реакции; ν_{C} – количество молей углерода в реакции. Индексы: g – параметры газа; k – параметры частиц; S – параметры внутренней вставки; b – начальные параметры, v – параметры на входе в горелку; st – значения параметров при $T_g = 300\ K$, 1 – параметры реакции в газовой фазе, 2 – параметры реакции на поверхности частиц, $i=1,...,N$ – номер фракции частиц, где нумерация идет по правилу: сначала реагирующие, затем инертные частицы, при этом для каждого типа частиц нумерация идет от наименьшего размера к наибольшему; $\lambda=\lambda_{\mathrm{st}}\left(\frac{T}{T_v}\right)^{2/3}$ – коэффициент теплопроводности газа; $D \sim \lambda(T)$ – коэффициент диффузии газа; $\alpha_S = \dfrac{\lambda\,\mathrm{Nu}_S}{h}$ – коэффициент теплообмена газа со стенками внутренней вставки; $\alpha_{k,i} = \dfrac{\lambda\,\mathrm{Nu}_g}{r_k}$ – коэффициент теплообмена газа с частицами. Коэффициент теплообмена газа с внутренней вставкой вычисляется из значения числа Нуссельта, Nu_S [6]:

$$\mathrm{Nu}_S = \begin{cases} 0.979\left(\dfrac{h\,\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}}{x}\right)^{0.33}, & \dfrac{h\,\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}}{x} > 1000, \\ 3.78 + (\mathrm{Nu}_* - 3.78)\dfrac{h\,\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}/x - 100}{900}, & 100 \le \dfrac{h\,\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}}{x} \le 1000, \\ 3.78, \quad \dfrac{h\,\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}}{x} < 100. \end{cases}$$

Здесь $\mathrm{Pr} = \dfrac{c\,\eta}{\lambda}$ – число Прандтля, $\mathrm{Re} = \dfrac{\rho u\,h}{\eta}$ – число Рейнольдса, Nu_* – значение числа Нуссельта, соответствующее значению $\dfrac{h\,\mathrm{Re}\,\mathrm{Pr}}{x} = 1000$, Nu_D – диффузионное число Нуссельта.

Скорость изменения массы частиц вычисляется из уравнения: $G = n_k S_k j_1 \rho_{O2}$, где $j_1 = \beta_m k_{O2} \exp(-E_2/R_u T_k) / [\beta_m + k_{O2} \exp(-E_2/R_u T_k)]$ – скорость гетерогенной реакции на частицах, где $\beta_m = \lambda_g(T)\mathrm{Nu}_D / (c_g \rho_g r_k)$ – коэффициент массоотдачи частиц [5]. При расчете принято, что для инертных частиц скорость изменения массы равна нулю, $G_i = 0$, радиус инертных частиц не меняется с повышением температуры.

Задача (1) – (14) решалась численно. Метод решения изложен в [4]. Уравнения энергии (1) – (2) и уравнения баланса массы метана (4) и кислорода (5) решались конечно-разностным методом с использованием преобразования Самарского, обеспечивающего второй порядок точности. Уравнения неразрывности газа (7), энергии (3), счетной концентрации (9) и баланса массы частиц (8) решались явно с использованием конечных разностей против потока. Шаг по пространству задавался аналогично [4] и был равен 10^{-5} м. Шаг по времени вычислялся согласно условию устойчивости Куранта.

В качестве начальных условий (11) задавались установившиеся распределения параметров, соответствующие устойчивому горению 6 %-й метано-воздушной смеси при скорости подачи смеси 0.3 м/с. В расчетах начальное условие вытесняется запыленным газом с меньшим содержанием метана. Задача решается до момента установления фронта горения. Под установлением фронта горения подразумевался выход координаты фронта горения на устойчивое положение. Координатой фронта горения считалась точка пространства, в которой концентрация окислителя равна половине от входной концентрации. Расчеты проводились для параметров [4].

На рис. 1 представлены распределения температуры, соответствующие установившемуся горению угле-метано-воздушной смеси с $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 2$ %., $m_{\mathrm{dust}} = \sum\limits_{i=1,\ldots,N} m_{\mathrm{dust},i} = 0.03$ кг/м^3. Задавалось, что пыль состоит из 4 реагирующих фракций. Размер частиц фракций задавался равным $r_{k,1} = 0.65\cdot10^{-6}$ м, $r_{k,2} = 1.3\cdot10^{-6}$ м, $r_{k,3} = 2\cdot10^{-6}$ м, $r_{k,4} = 3\cdot10^{-6}$ м. Использовалось распределение масс фракций частиц по размерам: $m_{\mathrm{dust},1} = 0.4\, m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust},2} = 0.3\, m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust},3} = 0.2\, m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust},4} = 0.1\, m_{\mathrm{dust}}$. Согласно рисунку, первыми воспламеняются частицы радиуса $r_{k,3} = 2\cdot10^{-6}$ м. За счет теплообмена с горящими частицами фракции воспламеняется газ и затем частицы других фракций.

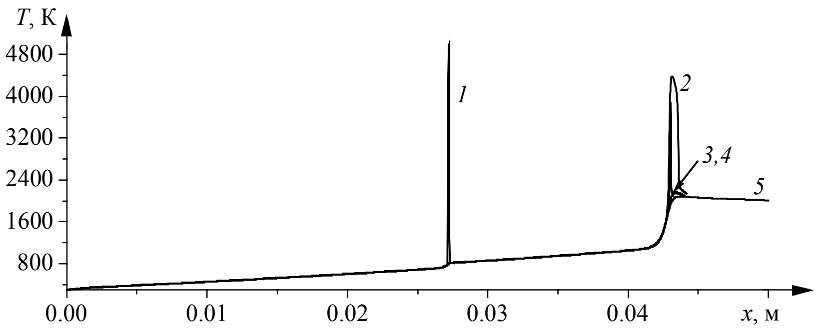


Рис. 1. Распределения температуры газа (кр. *5*) и частиц (кр. *1 – 4*). Кривые: *1* – $T_{k,3}$, *2* – $T_{k,4}$, *3* – $T_{k,1}$, *4* –$T_{k,2}$. $r_{k,1} = 0.65\cdot10^{-6}$ м, $r_{k,2} = 1.3\cdot10^{-6}$ м, $r_{k,3} = 2\cdot10^{-6}$ м, $r_{k,4} = 3\cdot10^{-6}$ м. $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 2$ %, $m_{\mathrm{dust}} = 0.03$ кг/м^3

Fig. 1. Distribution of the temperature of gas (curve 5) and particles (curves *1–4*). Curves: (*1*) $T_{k,3}$, (*2*) $T_{k,4}$, (*3*) $T_{k,1}$, (*4*) $T_{k,2}$. $r_{k,1} = 0.65\cdot10^{-6}$ m, $r_{k,2} = 1.3\cdot10^{-6}$ m, $r_{k,3} = 2\cdot10^{-6}$ m, $r_{k,4} = 3\cdot10^{-6}$ *m*. $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 2$ %, $m_{\mathrm{dust}} = 0.03$ kg/m^3

Первая серия расчета была выполнена для определения влияния объемного содержания метана в смеси на устойчивость горения УМВС. Массовое содержание метана на входе в горелку соответствовало объемному содержанию метана $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 2$ и 4%. Количество фракций пыли задавалось равным $N = 4$, полагалось, что все фракции являются реагирующими. Размер частиц и процентное содержание масс фракций соответствовали рис. 1: $r_{k,1} = 0.65\cdot10^{-6}$ м, $r_{k,2} = 1.3\cdot10^{-6}$ м, $r_{k,3} = 2\cdot10^{-6}$ м, $r_{k,4} = 3\cdot10^{-6}$ м, $m_{\mathrm{dust},1} = 0.4\, m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust},2} = 0.3\, m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust},3} = 0.2\, m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust},4} = 0.1\, m_{\mathrm{dust}}$. В расчетах варьировалась величина скорости подачи смеси на входе в горелку U_v и общая массовая концентрация пыли $m_{\mathrm{dust}} = \sum\limits_{i=1,\ldots,N} m_{\mathrm{dust},i}$.

Кривые, определяющие границу устойчивого горения УМВС, представлены на рис. 2. На рис. 2, *a* граница области устойчивого горения определена относительно массы пыли. На рис. 2, *b* выполнен пересчет результатов на величину избытка окислителя в смеси. Избыток окислителя определялся как отношение массы непрореагировавшего кислорода к начальной массе кислорода в смеси, $\phi = \left[a_{\mathrm{O2},v} - \left(\dfrac{\mu_{\mathrm{O2}}\nu_{\mathrm{O2}}}{\mu_{\mathrm{CH4}}\nu_{\mathrm{CH4}}} a_{\mathrm{CH4},v} + \dfrac{\mu_{\mathrm{O2}}\nu_{\mathrm{O2}}}{\mu_{\mathrm{C}}\nu_{\mathrm{C}}} m_{\mathrm{dust}} \right) \right] \Big/ a_{\mathrm{O2},v}$. Кривая *1* на рис. 2 соответствует смеси с объемным содержанием метана $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 4$ %, кривая *2* – смеси с

$a_{\mathrm{CH4,vol}} = 2$ %. Согласно полученным результатам, смесь с $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 4$ % горит устойчиво в большем диапазоне значений скорости подачи смеси на входе в горелке по сравнению со случаем $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 2$ %. Пересчет результатов на коэффициент избытка окислителя ϕ дает такой же вывод. Согласно рис. 2, *b*, при одном и том же значении ϕ граница области устойчивого горения смеси с $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 4$ % выше, чем смеси с $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 2$ %.

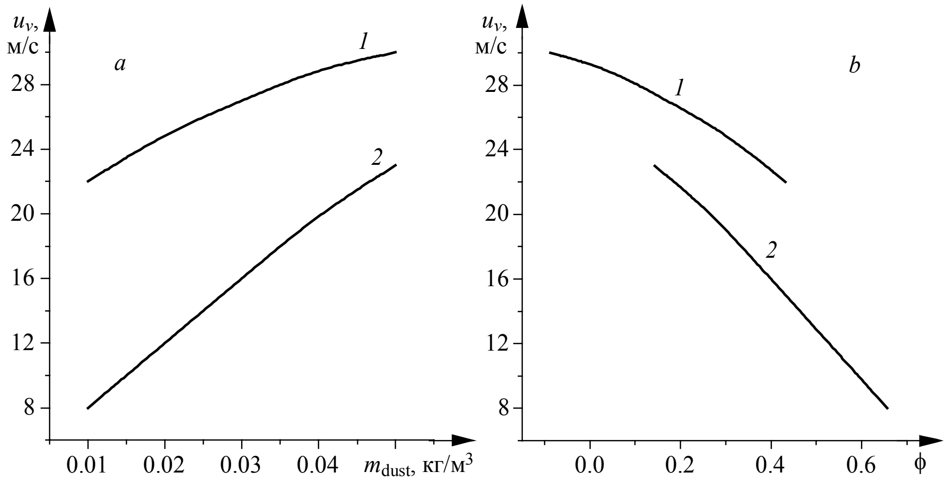


Рис. 2. Граница области устойчивого горения: кр. *1* – $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 4$ %, кр. *2* – $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 2$ %. (*a*) – результаты, представленные относительно массы пыли; (*b*) – результаты, представленные относительно коэффициента избытка окислителя

Fig. 2. Boundary of the region of stable combustion. (*1*) $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 4$ %, (*2*) $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 2$ %. The results reported in relation to the (*a*) mass of coal dust and (*b*) excess oxidant ratio

Результаты работы [4] показали, что на устойчивость горения монодисперсной взвеси угольных частиц в метано-воздушной смеси сильно влияет размер частиц. Для расчета по определению влияния размера частиц на устойчивость горения полидисперсной взвеси угольных частиц в метано-воздушной смеси были использованы два набора частиц, отличающиеся процентным соотношением между крупными и мелкими частицами. Полагалась, что пыль состоит из четырех фракций. Размер частиц соответствовал предыдущему расчету. Объемное содержание метана в смеси задавалось равным $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 4$ % и $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 3$ %. Для расчета были выбраны наборы с процентным соотношением между массами фракций: ($m_{\mathrm{dust,1}} = 0.4m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust,2}} = 0.3m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust,3}} = 0.2m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust,4}} = 0.1m_{\mathrm{dust}}$) и ($m_{\mathrm{dust,1}} = 0.77m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust,2}} = 0.15m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust,3}} = 0.05m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust,4}} = 0.03m_{\mathrm{dust}}$). Для второго набора процентное соотношение между фракциями частиц было изменено в сторону увеличения массы мелкодисперсной фракции, процентное соотношение между фракциями для второго набора соответствует наблюдениям [7]. Результаты расчета представлены на рис. 3. На рис. 3, *a* представлены результаты расчета для смесей с объемным содержанием метана $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 3$ %, на рис. 3, *b* – результаты для $a_{\mathrm{CH4,vol}} = 4$ %. Кривые *1* соответствуют пыли с составом фракций ($m_{\mathrm{dust,1}} = 0.77m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust,2}} = 0.15m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust,3}} = 0.05m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust,4}} = 0.03m_{\mathrm{dust}}$), кривые *2* соответствуют составу ($m_{\mathrm{dust,1}} = 0.4m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust,2}} = 0.3m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust,3}} = 0.2m_{\mathrm{dust}}$, $m_{\mathrm{dust,4}} = 0.1m_{\mathrm{dust}}$).

Согласно полученным результатам, с увеличением доли мелкодисперсной фракции область устойчивого горения УМВС расширяется. При этом для смеси с меньшим содержанием метана, $a_{CH4,vol} = 3$ %, (рис. 3, *a*) граница области устойчивого горения при увеличении доли мелкодисперсной фракции и с увеличением массового содержания пыли сдвигается сильнее, чем граница области для состава с $a_{CH4,vol} = 4$ %.

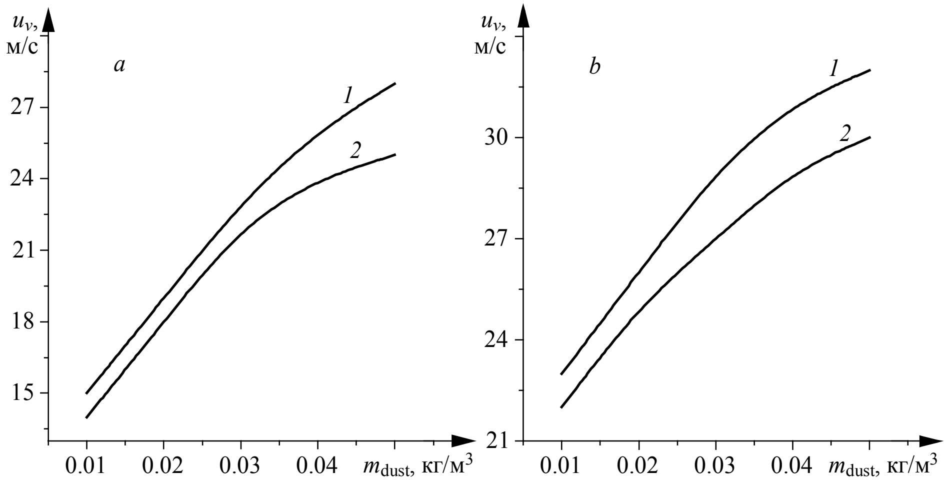


Рис. 3. Граница области устойчивого горения: (*a*) – $a_{CH4,vol} = 3$ %; (*b*) – $a_{CH4,vol} = 4$ %. кр. *1* – состав (3% $r_{k,1}$, 5% $r_{k,2}$, 15% $r_{k,3}$, 77% $r_{k,4}$), кр. *2* – состав (10% $r_{k,1}$, 20% $r_{k,2}$, 30% $r_{k,3}$, 40% $r_{k,4}$)
Fig. 3. Boundary of the region of stable combustion. (*a*) $a_{CH4,vol} = 3$ % and (*b*) $a_{CH4,vol} = 4$ %. *1*, composition (3% $r_{k,1}$, 5% $r_{k,2}$, 15% $r_{k,3}$, 77% $r_{k,4}$); *2*, composition (10% $r_{k,1}$, 20% $r_{k,2}$, 30% $r_{k,3}$, 40% $r_{k,4}$)

Для расчетов по определению влияния инертной фазы на устойчивость горения УМВС была выбрана смесь, состоящая из $N = 8$ фракций с размерами $r_{k,1} = r_{k,5} = 0.65\cdot10^{-6}$ м, $r_{k,2} = r_{k,6} = 1.3\cdot10^{-6}$ м, $r_{k,3} = r_{k,7} = 2\cdot10^{-6}$ м, $r_{k,4} = r_{k,8} = 3\cdot10^{-6}$ м. Размер частиц соответствует предыдущим расчетам. Первые четыре фракции полагались реагирующими, фракции с 5 по 8 полагались инертными. Процентное массовое содержание инертных частиц в пыли задавалось равным 10 % от общей массы пыли. Распределение процентного массового содержания частиц по размерам было следующим: $m_{dust,1} = 0.36m_{dust}$, $m_{dust,2} = 0.27m_{dust}$, $m_{dust,3} = 0.18m_{dust}$, $m_{dust,4} = 0.09\ m_{dust}$, $m_{dust,5} = 0.04\ m_{dust}$, $m_{dust,6} = 0.03\ m_{dust}$, $m_{dust,7} = 0.02\ m_{dust}$, $m_{dust,8} = 0.01m_{dust}$. Объемное содержание метана в смеси составляло 2 %. Результаты расчета представлены на рис. 4. Согласно рис. 4, граница области устойчивого горения состава с инертными частицами находится ниже границы области устойчивого горения состава без инертных частиц. Более того, с увеличением массовой концентрации пыли в смеси растет разрыв между границами областей. Это значит, что с увеличением массовой концентрации пыли инертные частицы оттягивают на себя больше тепла. Характер кривой, описывающей границу области устойчивого горения, меняется. Расширение области с увеличением массовой концентрации частиц для смеси с инертными частицами происходит медленнее, чем для смеси без инертных частиц.

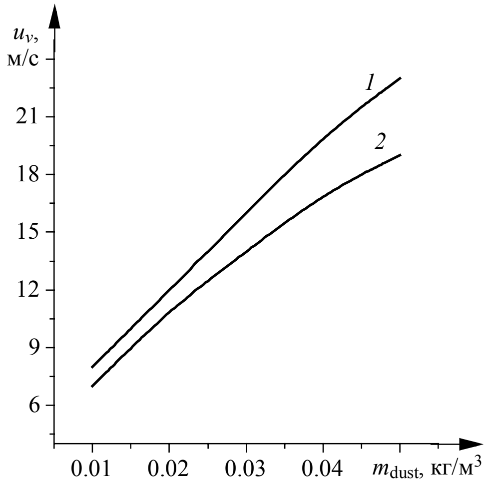


Рис. 4. Граница области устойчивого горения: кр. *1* – состав без инертных частиц, кр. *2* – состав с 10 % инертных частиц
Fig. 4. Boundary of the region of stable combustion. (*1*) composition without inert particles and (*2*) composition with 10% of inert particles

Выводы

Решена задача об устойчивости горения полидисперсной взвеси угольной пыли в метано-воздушной смеси в горелке с рекуперацией тепла. На устойчивость горения угле-метано-воздушной смеси влияет набор параметров, таких, как размер частиц, объемное содержание метана в смеси и массовое содержание частиц. При этом в настоящей работе показано, что на устойчивость горения угле-метано-воздушной смеси также оказывает влияние соотношение между массовым содержанием инертных и реагирующих частиц и соотношение между мелкодисперсными и крупнодисперсными фракциями частиц пыли. Смесь с большим процентным содержанием массы мелкодисперсной фракции горит устойчиво в большем диапазоне скоростей подачи смеси на входе в горелку. Присутствие инертных частиц приводит к уменьшению диапазона скорости подачи смеси, в котором возможно устойчивое горение УМВС.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Калякин С.*, *Костенко В.*, *Завьялова Е.*, *Штрох Л.* Влияние примесей шахтных горючих газов на взрывоопасность угольных аэрозолей // Aktualne Problemy Zwalczania Zagrożeń Górniczych: II Konferencja Naukowo-Techniczna. Brenna, 2012. № 7–9. С. 176–184.
2. *Rockwell S.R.*, *Rangwala A.S.* Influence of coal dust on premixed turbulent methane–air flames // Combustion and Flame. 2013. V. 160. P. 635–640.
3. *Дементьев А.А.*, *Моисеева К.М.*, *Крайнов А.Ю.*, *Палеев Д.Ю.* Сопоставление результатов моделирования распространения пламени в гибридной газовзвеси с экспериментальными данными // Инженерно-физический журнал. 2016. Т. 89. № 6. С. 1538–1546.
4. *Крайнов А.Ю.*, *Моисеева К.М.* Горение угле-метано-воздушной смеси в горелке с рекуперацией тепла // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2016. № 3(41). С. 65–73.
5. *Франк-Каменецкий Д.А.* Диффузия и теплопередача в химической кинетике. М.: Наука, 1987.

6. *Справочник* по теплообменникам: в 2 т. Т. 1 / пер. с англ., под ред. Б.С. Петухова, В.К. Шикова. М.: Энергоатомиздат, 1987.
7. *Васильев А.А.*, *Пинаев А.В.*, *Трубицын А.А. и др.* Что горит в шахте: метан или угольная пыль? // Физика горения и взрыва. 2017. Т. 53. № 1. С. 11–18.

Статья поступила 1.04.2017 г.

Moiseeva K.M., Krainov A.Yu., Moiseev D.M. (2017) STABILITY OF THE COMBUSTION OF POLYDISPERSE COAL-METHANE-AIR MIXTURE IN THE HEAT RECOVERY BURNER. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 48. pp. 82–90

DOI 10.17223/19988621/48/8

The problem of the stability of combustion of a polydisperse suspension of coal dust in a methane-air mixture within the burner with a heat recovery is solved. The boundary of a stable combustion of coal-methane-air mixture is determined in relation to the composition and feed rate of the mixture at the burner inlet. It is shown that the stability of combustion of coal-methane-air mixture is affected by the ratio between the mass content of the inert and reacting particles and the ratio between finely dispersed and coarsely dispersed fractions of dust particles. The mixture containing a high percentage of the mass of finely dispersed fraction burns steadily in a wide range of the feed rates of mixture at the burner inlet. The presence of inert particles leads to the reduction in the mixture feed rate range within which the stable combustion of carbon-methane-air mixture is possible.

Keywords: coal-methane-air mixture, polydisperse coal dust, slot burner, combustion stability.

KRAINOV Aleksey Yurievich (Doctor of Physics and Mathematics, Assoc. Prof., Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation)
E-mail: akrainov@ftf.tsu.ru

MOISEEVA Kseniya Mikhaylovna (Candidate of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation)
E-mail: Moiseeva_KM@t-sk.ru

MOISEEV Dmitriy Mikhaylovich (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation)
E-mail: dmm1@sibmail.com

REFERENCES

1. Kalyakin S., Kostenko V., Zav'yalova E., Štroch L. (2012) Effect of impurities mine combustible gases on explosion dangerin of coal aerosol. *Aktualne problemy zwalczania zagrożeń górniczych: II konferencja naukowo-techniczna*. Brenna. 7–9. pp. 176–184.
2. Rockwell S.R., Rangwala A.S. (2013) Influence of coal dust on premixed turbulent methane–air flames. *Combustion and Flame*. 160. pp. 635–640. DOI: 10.1016/j.combustflame. 2012.10.025.
3. Dement′ev A.A., Moiseeva K.M., Krainov A.Yu., Paleev D.Yu. (2016) Comparison of the results of modeling the flame propagation in a hybrid gas suspension with experimental data. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. 89(6). pp. 1514–1521. DOI: 10.1007/s10891-016-1521-6.
4. Krainov A.Yu., Moiseeva K.M. (2016) Combustion of the coal-methane-air mixture in the heat recovery burner. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 2(41). pp. 65–73. DOI: 10.17223/19988621/41/7.
5. Frank-Kamenetskiy D.A. (1987) *Diffuziya i teploperedacha v khimicheskoy kinetike* [Diffusion and Heat Transfer in Chemical Kinetics]. Moscow: Nauka.
6. Isachenko I.P., Osipova V.A., Sukomel A.S. (1975) *Heat Transmission*. Moscow: Energiya.
7. Vasil'ev A.A., Pinaev A.V., Trubitsyn A.A., et al. (2017) What is burning in coal mines: methane or coal dust? *Combustion*, *Explosion and Shock Waves*. 53(1). pp. 8–14. DOI: 10.1134/S0010508217010026.

УДК 004.94 : 539.62
DOI 10.17223/19988621/48/9

А.Ю. Смолин, Г.М. Еремина

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ МАТЕРИАЛА ПОДЛОЖКИ НА ДЕФОРМИРОВАНИЕ И РАЗРУШЕНИЕ СИСТЕМЫ «ПОКРЫТИЕ – ПОДЛОЖКА»

Для исследования механических свойств систем «покрытие – подложка» обычно применяют такие методы, как измерительное индентирование и царапание. Техническая ограниченность современных приборов создает определённые трудности при исследовании таких композиций. Изучался численно методом подвижных клеточных автоматов процесс измерительного индентирования и царапания упрочняющего покрытия на различных подложках. В результате моделирования были установлены особенности влияния материала подложки на извлекаемые указанными методами механические характеристики и процессы деформирования и разрушения системы.

Ключевые слова: *наноиндентирование*, *измерительное царапание*, *моделирование*, *метод подвижных клеточных автоматов*, *упрочняющие покрытия.*

Особый интерес сегодня вызывает использование ультратонких покрытий, которые зачастую находятся в наноструктурном состоянии. Исследовать материалы таких покрытий стандартными тестами невозможно, так как они существуют только на подложках, которые оказывают существенное влияние на механический отклик всей системы. Для исследования свойств систем «покрытие – подложка» применяют специальные экспериментальные методики, такие, как измерительное индентирование, царапание и т.д.

С помощью измерительного индентирования обычно определяется твёрдость, модуль Юнга, упругое восстановление. Наиболее распространённым способом обработки результатов измерительного наноиндентирования является методика Оливера – Фарра [1]. Данная методика предполагает, что материал подложки не оказывает существенного влияния на извлекаемые характеристики при глубине внедрения менее 1/10 от толщины покрытия, однако экспериментальные данные [2–4], а также результаты численных расчётов опровергают это предположение [5–7]. Стоит отметить, что большое влияние на результаты натурного эксперимента могут оказывать дефекты поверхностного слоя материала покрытия, наличие переходного слоя, особенности структуры материалов (размер зерна, наличие включений). С помощью измерительного царапания определяются такие характеристики, как коэффициент трения, адгезия и т.д.

Отсутствие необходимой чувствительности и разрешающей способности современных приборов создаёт определённые ограничения для экспериментального исследования таких систем. Решением этой проблемы может стать компьютерное моделирование. С помощью континуальных методов исследуется макроскопический отклик материала, а с помощью дискретных методов – процессы, протекающие на микроуровне, такие, как зарождение и движение дислокаций и т.д. Наибольшее распространение для численного исследования адгезии покрытия получили континуальные методы. Следует отметить, что моделирование разрушения с образованием новых поверхностей в методах, основанных на законах механики сплошных сред, – трудоёмкий процесс. Для этих целей используют расширенный метод конечных элементов (XFEM) [8–9], который предполагает использование весьма больших вычислительных мощностей. Для упрощённого описания процесса разрушения используют модель когезионной зоны (cohesive zone) [10], главным недостатком которой является то, что расположение трещин уже заранее предопределено, а это, в свою очередь, даёт неточную картину деформирования и разрушения системы «покрытие – подложка».

Для корректного численного исследования механического поведения материала при измерительном индентировании и царапании необходимо использовать метод, позволяющий описывать процессы, протекающие как на макроуровне (отклик системы в целом), так и на мезоуровне (с учётом структурных элементов образца), не локализуя повреждённую область в изначально заданном месте, и учитывающий особенности структуры материалов. На наш взгляд, таким методом является метод подвижных клеточных автоматов, основанный на дискретном представлении материала, так как данный метод позволяет имитировать неоднородности структуры материала (размер автомата выбирается соответствующим среднему размеру зерна, и разрушение идёт вдоль границ «зёрен»), а также процесс разрушения в любом месте модельного образца с учётом взаимодействия получающихся фрагментов.

1. Математическая модель

1.1. Описание метода подвижных клеточных автоматов

Метод подвижных клеточных автоматов (далее используется общепринятая аббревиатура от английского MCA – movable cellular automata) [11] является численным методом, основанным на концепции частиц, которая имеет существенные отличия от численных методов, основанных на решении уравнений классической механики сплошных сред.

В методе подвижных клеточных автоматов предполагается, что материал состоит из определённого количества элементарных объектов конечного размера (автоматов), которые взаимодействуют друг с другом и могут перемещаться в пространстве, тем самым моделируя реальные процессы деформации. Движение ансамбля частиц описывается уравнениями Ньютона – Эйлера:

$$\begin{cases} m_i \dfrac{d^2 \boldsymbol{R}_i}{dt^2} = \sum\limits_{j=1}^{N_i} \boldsymbol{F}_{ij}^{\text{pair}} + \boldsymbol{F}_i^{\Omega}, \\ \hat{J}_i \dfrac{d\boldsymbol{\omega}_i}{dt} = \sum\limits_{j=1}^{N_i} \boldsymbol{M}_{ij}, \end{cases} \tag{1}$$

где $\boldsymbol{R}_i$, $\boldsymbol{\omega}_i$, m_i и $\hat{J}_i$ – радиус-вектор, скорость вращения, масса и момент инерции автомата i соответственно, $\boldsymbol{F}_{ij}^{\text{pair}}$ – парная сила механического взаимодействия автоматов i и j, $\boldsymbol{F}_i^{\Omega}$ – объёмнозависящая сила, действующая на автомат i и обусловленная взаимодействием его соседей с другими автоматами. В последнем уравнении $\boldsymbol{M}_{ij} = q_{ij}(\boldsymbol{n}_{ij} \times \boldsymbol{F}_{ij}^{\text{pair}}) + \boldsymbol{K}_{ij}$, здесь q_{ij} – расстояние от центра i-го автомата до точки его взаимодействия (контакта) с j-м автоматом (рис. 1), $\boldsymbol{n}_{ij} = (\boldsymbol{R}_j - \boldsymbol{R}_i)/r_{ij}$ – единичный вектор ориентации пары и r_{ij} – расстояние между центрами автоматов (рис. 1), $\boldsymbol{K}_{ij}$ – крутящий момент, обусловленный относительным вращением.

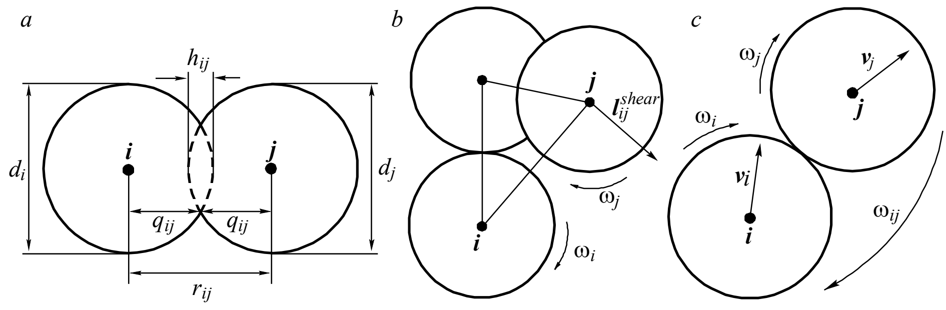


Рис. 1. Схематическое представление пары подвижных клеточных автоматов, их размерные и кинематические параметры
Fig. 1. Schematic representation of a movable pair of cellular automata with their dimensional and kinematic parameters

С помощью процедуры осреднения для тензора напряжений в объёме произвольной частицы, изложенной в работах [12, 13], осуществляется переход от сил к напряжениям, и выражение для компонент усреднённого тензора напряжений в автомате i принимает вид

$$\bar{\sigma}_{\alpha\beta}^{i} = \frac{1}{V_i} \sum_{j=1}^{N_i} q_{ij} n_{ij,\alpha} F_{ij,\beta} \tag{2}$$

где α и β обозначают оси X, Y, Z лабораторной системы координат, V_i – текущий объём автомата i, $n_{ij,\alpha}$ – α-компонента единичного вектора $\boldsymbol{n}_{ij}$ и $\boldsymbol{F}_{ij,\beta}$ – β-компонента полной силы, действующей в точке «контакта» между автоматами i и j.

Знание компонент тензора напряжений позволяет вычислять все его инварианты в объёме автомата, в частности давление P_i (или, что то же самое, среднее напряжение $\bar{\sigma}_{\text{mean}}^{i}$)

$$P_i = -\bar{\sigma}_{\text{mean}}^{i} = -\frac{\bar{\sigma}_{xx}^{i} + \bar{\sigma}_{yy}^{i} + \bar{\sigma}_{zz}^{i}}{3} \tag{3}$$

и интенсивность напряжений

$$\bar{\sigma}_{\text{int}}^{i} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\left(\bar{\sigma}_{xx}^{i} - \bar{\sigma}_{yy}^{i}\right)^2 + \left(\bar{\sigma}_{yy}^{i} - \bar{\sigma}_{zz}^{i}\right)^2 + \left(\bar{\sigma}_{zz}^{i} - \bar{\sigma}_{xx}^{i}\right)^2 + 6\left[\left(\bar{\sigma}_{xy}^{i}\right)^2 + \left(\bar{\sigma}_{yz}^{i}\right)^2 + \left(\bar{\sigma}_{xz}^{i}\right)^2\right]}. \tag{4}$$

Для описания упругопластического поведения в рамках метода МСА предлагается использовать теорию пластического течения, а именно модель пластичности с линейным упрочнением с критерием Мизеса. Для этого к методу МСА был адаптирован известный алгоритм Уилкинса [11]. Этот алгоритм состоит в решении упругой задачи на каждом временном шаге и последующем «сбросе» компонент девиатора тензора напряжений $D_{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta} - 1/3\,\sigma_{kk}\delta_{\alpha\beta}$ на поверхность текучести Мизеса в случае, когда интенсивность напряжений превышает заданную предельную величину:

$$D'_{\alpha\beta} = D_{\alpha\beta} \cdot M\,, \tag{5}$$

где $M = \sigma_{pl} / \sigma_{\mathrm{int}}$, σ_{int} – интенсивность напряжений, σ_{pl} – радиус круга текучести Мизеса.

Этот алгоритм, в применении к автомату *i*, может быть записан в следующих обозначениях:

$$\begin{cases} \left(\overline{\sigma}^i_{\alpha\alpha}\right)' = \left(\overline{\sigma}^i_{\alpha\alpha} - \overline{\sigma}^i_{\mathrm{mean}}\right) M_i + \overline{\sigma}^i_{\mathrm{mean}}, \\ \left(\overline{\sigma}^i_{\alpha\beta}\right)' = \overline{\sigma}^i_{\alpha\beta}\, M_i, \end{cases} \tag{6}$$

где $\alpha,\beta = X,\ Y,\ Z$ и $\alpha\neq\beta, \left(\overline{\sigma}^i_{\alpha\beta}\right)'$ – скорректированные компоненты осреднённого тензора напряжений, $\overline{\sigma}^i_{\alpha\beta}$ – компоненты тензора напряжений, которые получаются в результате решения упругой задачи на текущем временном шаге, $M_i = \sigma^i_{pl} / \overline{\sigma}^i_{\mathrm{int}}$ – текущее значение коэффициента «сброса», σ^i_{pl} – текущее значение радиуса круга текучести Мизеса для автомата *i*.

Таким образом, реологические свойства материала автомата *i* определяются заданием единой кривой упрочнения $\overline{\sigma}^i_{\mathrm{int}} = \Phi\left(\overline{\varepsilon}^i_{\mathrm{int}}\right)$ (здесь $\overline{\varepsilon}^i_{\mathrm{int}}$ – интенсивность осреднённого тензора деформаций, компоненты которого могут быть вычислены аналогично $\overline{\sigma}^i_{\alpha\beta}$ [14]), эта зависимость также называется в МСА функцией отклика автомата.

Для вычисления сил, действующих между автоматами, в данном исследовании предлагается использовать две функции отклика: функцию упругого взаимодействия (рис. 2, *a*), служащую для описания механического поведения хрупких оксидных подложек, а функцию упругопластического поведения материала (рис. 2, *b*), использующуюся для описания покрытия и подложки из наноструктурного титана.

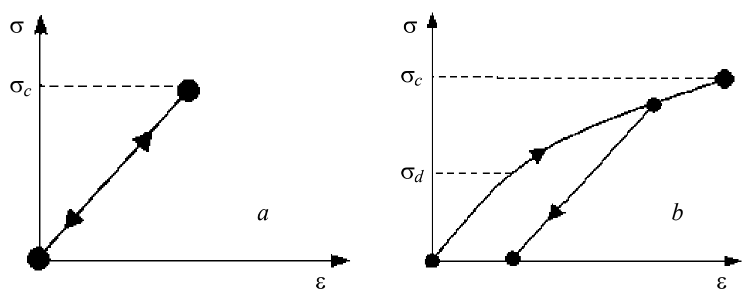


Рис. 2. Типы функций отклика, описывающие механическое поведение материала: *a* – упругое; *b* – упругопластическое
Fig. 2. Types of the response functions describing the mechanical behavior of the material: (*a*) elastic and (*b*) elastoplastic

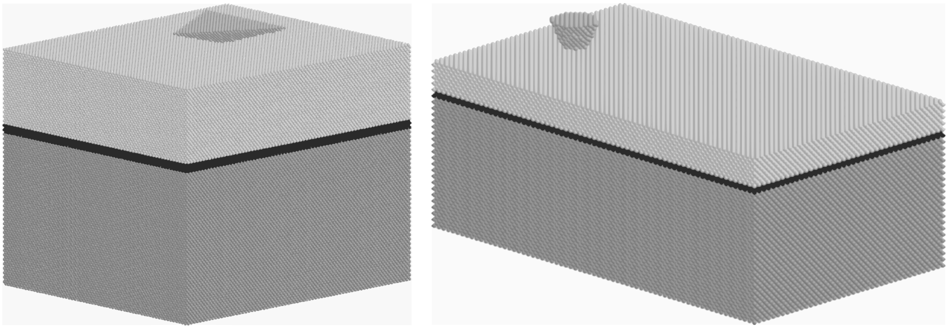
Пару элементов метода МСА можно рассматривать как виртуальный бистабильный автомат (у него существуют два состояния: связанная и несвязанная пара), что позволяет явно моделировать процессы разрушения в методе МСА. Заданием правил перехода пары из состояния связанной в состояние несвязанной формулируется критерий разрушения моделируемого материала, который, вообще говоря, определяется физическими механизмами деформации материала. Заметим, что переключение пары автоматов в несвязанное состояние приводит к изменению сил, действующих на элементы, в частности они не будут сопротивляться взаимному удалению друг от друга. В данной работе процессы разрушения моделировались с использованием критерия, основанного на достижении в паре порогового значения интенсивности деформаций.

Таким образом, метод МСА позволяет моделировать механическое поведение твёрдого тела, в том числе пластическое и вязкоупругое деформирование, разрушение, фрагментацию и дальнейшее взаимодействие фрагментов как сыпучей (гранулированной) среды.

1.2. Геометрическая модель процесса наноиндентирования

Геометрически модель процесса индентирования состоит из образца в форме параллелепипеда и индентора. Внизу образца находится основание, которое представляет собой пластину со сторонами, равными сторонам образца, и высотой, равной размеру автомата. На этом основании сверху располагается блок основного материала, далее могут следовать блоки различных слоёв покрытия. Сверху такой сборки располагается индентор. В задаче индентирования использовался трёхгранный индентор Берковича, в качестве материала которого использовался алмаз.

Изначально геометрия задачи задавалась в виде полигональной сетки для всех основных её элементов. На основе заданной полигональной сетки в пакете программ генерировалась клеточно-автоматная модель в виде ГЦК-упаковки частиц (автоматов). На рис. 3 представлена такая модель, на которой автоматы изображены сферами.



a *b*

Рис. 3. Геометрическая модель в виде упаковки автоматов для: *a* – индентирования, *b* – царапания
Fig. 3. Geometrical model represented as an automata packing for (*a*) indentation and (*b*) scratch-test

В данном исследовании моделировались покрытия толщиной 1800 нм. При этом учитывался переходный слой между материалом покрытия и подложкой (тёмный слой на рис. 3). Эта зона имела механические характеристики, соответствующие средним величинам между значениями для покрытия и подложки. Толщина подложки варьировалась в зависимости от задаваемой глубины погружения так, чтобы общая толщина модельного образца была не менее 1/10 от глубины внедрения индентора и в среднем составляла около 200 нм.

В расчётах скругление вершины индентора, имеющее место в реальных экспериментальных установках, учитывалось усечением вершины пирамиды так, чтобы сторона получающейся треугольной грани на вершине равнялась радиусу скругления. Высота индентора в модели определялась максимальной глубиной вдавливания.

Процесс нагружения при индентировании и царапании имитировался заданием скоростей верхнему слою автоматов индентора. В случае индентирования скорость прикладывалась к индентору в вертикальном (ось Z) направлении. Для уменьшения динамических эффектов на начальном этапе скорость плавно увеличивалась от нуля до максимального значения. В случае измерительного царапания скорость прикладывалась в вертикальном (ось Z) и горизонтальном (ось Y) направлениях, при погружении контртела на заданную глубину прекращалось приложение скорости в вертикальном направлении. При этом нижняя поверхность образца была закреплена, а его боковые поверхности свободны.

Для моделирования процесса измерительного царапания использовался индентор в виде усечённого конуса с углом образующей 60° (рис. 3, *b*).

Размер подвижного клеточного автомата (элемента модели) не может превышать минимальный размер задачи, т.е. толщину покрытия или переходного слоя. Чтобы моделировать разрушение в покрытии, оно должно состоять как минимум из двух автоматов в толщину. Исходя из этих общих требований и возможности получать достаточно детальную картину процесса при допустимом времени расчёта, размер клеточного автомата варьировался в диапазоне от 10 до 100 нм. Толщина подложки составляла 3.5 мкм. Высота контртела в задаче царапания составляла 1.9 мкм.

1.3. Параметры модельных материалов

Для численного исследования влияния свойств материала подложки на механический отклик систем с упрочняющим покрытием рассматривались композиции, экспериментальное изучение которых представлено в работах [15–17]. Упрочняющее покрытие представляло собой многокомпонентную плёнку TiC-Ca-P-O-N многофункционального назначения. За основу была взята модель, ранее разработанная для моделирования такого покрытия на титане [18].

Динамика упругого тела характеризуется следующими параметрами: плотностью ρ, упругим модулем сдвига G, упругим модулем объёмной деформации K. Модель линейно упрочняющегося тела помимо этих параметров характеризуется пределом текучести σ_y, пределом прочности σ_B и деформацией, соответствующей пределу прочности ε_B.

Модельным образцам, имитирующим покрытие [15–17], были присвоены следующие физико-механические характеристики: $\rho = 4700$ кг/м^3, $G = 80$ ГПа, $K = 175$ ГПа (соответствующий модуль Юнга $E = 220$ ГПа), $\sigma_y = 9.5$ ГПа, $\sigma_B = 10.5$ ГПа и $\varepsilon_B = 0.075$. Предел текучести покрытия был оценён с помощью методики обратного анализа экспериментальной диаграммы измерительного индентирования [19]. Для определения предела прочности покрытия был проведён ряд тестовых расчётов по измерительному царапанию с различными значениями предела прочности модельного материала. Результаты расчётов сравнивались с данными натурного эксперимента, при этом начало разрушения поверхностных слоёв покрытия в численном эксперименте определялось резким увеличением количества несвязанных автоматов, а в эксперименте – по пикам акустической эмиссии [20].

По данным из литературных источников [21] для образцов наноструктурного титана были выбраны следующие значения параметров: $\rho = 4500$ кг/м^3, $G = 41$ ГПа, $K = 100$ ГПа (соответствующий модуль Юнга $E = 120.2$ ГПа), $\sigma_y = 1.0$ ГПа, $\sigma_В = 1.25$ ГПа и $\varepsilon_В = 0.15$.

По данным из литературных источников [22] для образцов плавленого кварца были выбраны следующие значения параметров: $\rho = 2201$ кг/м^3, $G = 31$ ГПа, $K = 36.9$ ГПа (соответствующий модуль Юнга $E = 73$ ГПа), следует отметить, что материал рассматривался как упруго-хрупкий с пределом прочности $\sigma_В = 1.1$ ГПа.

Для образцов сапфира задавались следующие параметры [23]: $\rho = 3970$ кг/м^3, $G = 148$ ГПа, $K = 240$ ГПа (соответствующий модуль Юнга $E = 365$ ГПа), материал рассматривался как упруго-хрупкий с пределом прочности $\sigma_В = 2.0$ ГПа.

Для определения адекватности выбранных параметров функции отклика подвижных клеточных автоматов, моделирующих материалы подложки и покрытия, строился трёхмерный кубический образец с ГЦК-упаковкой автоматов, который подвергался одноосному сжатию. Размер подвижного клеточного автомата выбирался в соответствии с минимальным размером зерна и составлял $d = 10$ нм. Размер стороны кубического образца h варьировался от 10 d до 30 d для того, чтобы определить представительный объём модельного образца, то есть такой объём, начиная с которого дальнейшее увеличение размеров не приводит к существенному изменению модуля упругости и предела текучести образцов на одноосное сжатие.

На основе расчётных данных был проведён анализ сходимости упругих и прочностных свойств образцов с увеличением их размеров. Для этого рассчитывались модули упругости на сжатие (наклон первого линейного участка диаграммы нагружения) и пределы текучести (точка пересечения двух прямых, отвечающих за упругое и пластическое поведение) для каждого из образцов. Относительное отклонение расчётных модулей упругости E_i всех образцов от модуля Юнга E приведено на рис. 4. Относительное отклонение расчётных пределов текучести σ_i всех образцов от заданного значения σ_y приведено на рис. 5. Результаты анализа показали, что представительными (отклонение упругого модуля не превышало 5 %, отклонение предела текучести не превышало 3 %) можно считать образцы с размером основания 200 нм (т.е. 20 d).

Таким образом, можно сделать вывод, что построенная модель достаточно хорошо описывает поведение реальных материалов при сжатии, поскольку результаты расчётов на представительных образцах показывают следующие свойства: 1) линейный вид диаграммы нагружения модельных образцов в упругой области деформирования; 2) линейный вид диаграммы, соответствующий линейному деформационному упрочнению в состоянии пластичности; 3) совпадение упругого модуля на одноосное сжатие (определяется углом наклона диаграммы в упругой области) с модулем Юнга E и значения напряжения при переходе в состояние пластичности расчётной диаграммы с пределом текучести σ_y с заданной точностью (5%).

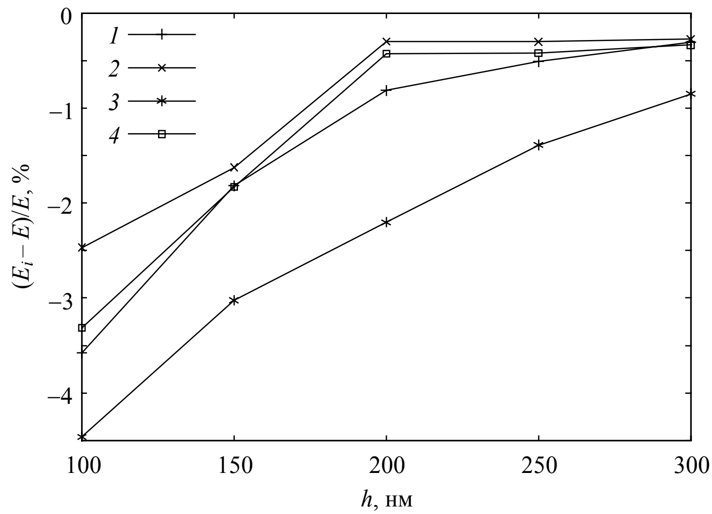


Рис. 4. Сходимость упругого модуля для образцов титана (кр. *1*), покрытия (кр. *2*), сапфира (кр. *3*) и плавленого кварца (кр. *4*)
Fig.4. Convergence of elastic modulus for the samples of Ti (*1*), TiCCaPON coating (*2*), sapphire (*3*), and fused silica (*4*)

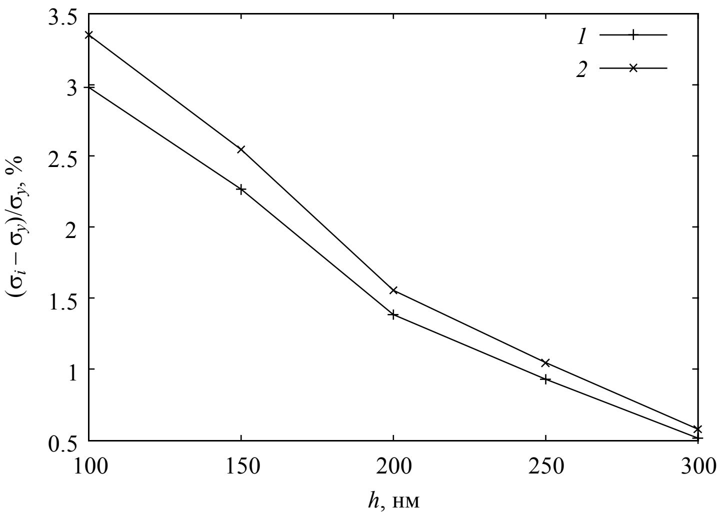


Рис. 5. Сходимость предела текучести для образцов титана (кр. *1*) и покрытия (кр. *2*)
Fig.5. Convergence of yield limit observed for the samples of Ti (*1*) and TiCCaPON coating (*2*)

2. Результаты моделирования

Как указано выше, существует гипотеза о том, что при глубине индентирования менее 1/10 от толщины покрытия подложка не оказывает влияние на извлекаемые механические характеристики. Однако как показали эксперименты это предположение неверно. При натурном эксперименте большое влияние может оказывать шероховатость поверхности, неоднородность структуры поверхностного слоя материала, наличие примесей, пор и других дефектов структуры. В данной работе предполагается, что с помощью компьютерного моделирования можно абстрагироваться от этих факторов и провести численный эксперимент по индентированию системы «покрытие – подложка», состоящей из бездефектных материалов.

Для исследования влияния свойств материала подложки на механические характеристики всей системы было проведено моделирование индентирования покрытия TiCCaPON толщиной 1800 нм на следующих различных подложках: наноструктурном титане, сапфире и плавленом кварце. По результатам обработки данных моделирования методом Оливера – Фарра были получены зависимости модуля упругости и твёрдости рассматриваемых систем от глубины проникновения индентора (рис. 6).

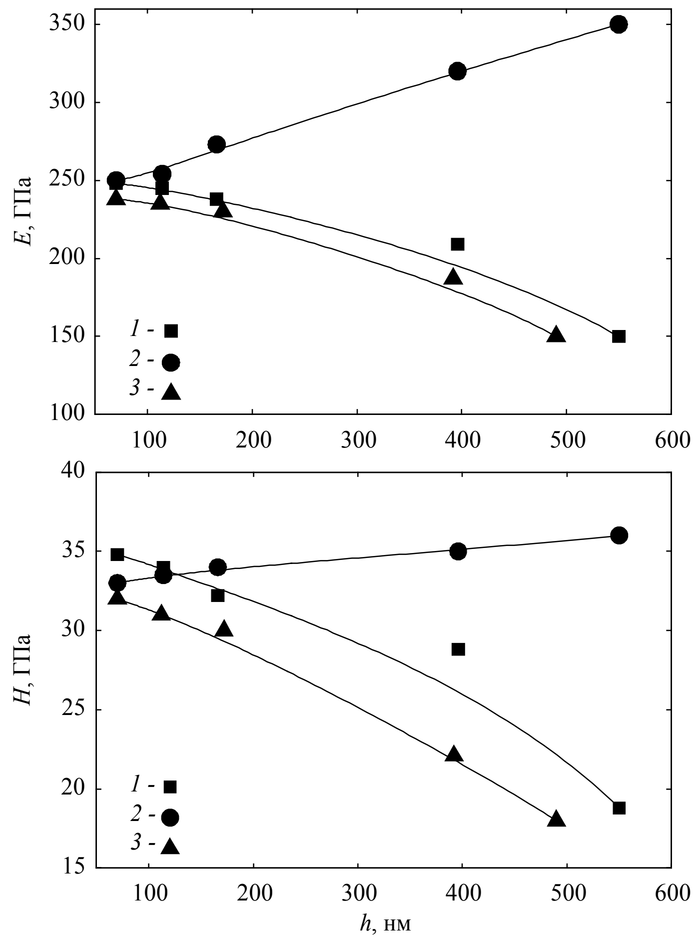


Рис. 6. Зависимости модуля упругости (*a*) и твёрдости (*b*) покрытия TiCCaPON на подложках из наноструктурного титана (*1*), сапфира (*2*), плавленого кварца (*3*), полученные в результате моделирования
Fig. 6. Dependences of the modulus of (*a*) elasticity and (*b*) hardness of a TiCCaPON coating on the substrates made of *1*,Ti; *2*, sapphire; and *3*, fused silica obtained in the modeling.

Полученные результаты сравнивались с данными натурного эксперимента, представленными в работе [24]. Для больших глубин индентирования (больше 200 нм) результаты численного моделирования показывают хорошее соответствие с результатами эксперимента, разница значений модуля Юнга и твёрдости не превышает 15 %. При малых глубинах внедрения (до 200 нм) имеется некоторое несоответствие данным натурного экспериментам в силу того, что численная модель не учитывает шероховатость рельефа и структуру приповерхностного слоя исследуемого образца (материал покрытия полагался однородным и изотропным).

Полученные результаты свидетельствуют о том, что материал подложки оказывает существенное влияние на извлекаемые механические характеристики систем с покрытиями даже при глубинах индентирования меньше рекомендованных для определения упругих и прочностных свойств материала покрытия (1/10 от толщины покрытия). Таким образом, имеющиеся экспериментальные факты, подтверждённые нашими расчётами, свидетельствуют о том, что необходимо разрабатывать новые и модифицировать существующие методики определения свойств покрытий с помощью измерительного индентирования.

Кроме индентирования при экспериментальном изучении свойств покрытий используется измерительное царапание. Поэтому следующей задачей настоящей работы являлось моделирование процесса измерительного царапания покрытий на различных подложках для определения его адгезионной прочности и характера разрушения под действием прогрессивного нагружения.

Полученные в результате расчётов данные показали, что при измерительном царапании покрытия на различных подложках можно выделить несколько этапов. На первом этапе, характерном для всех систем, наблюдается разрушение поверхностных слоёв покрытия. Для системы с подложкой из титана на втором этапе характерно появления шевронных трещин до переходного слоя, а на третьем – происходит локальное отслоение покрытия путём образования герцевских и шевронных трещин до материала подложки (рис. 7, *a*).

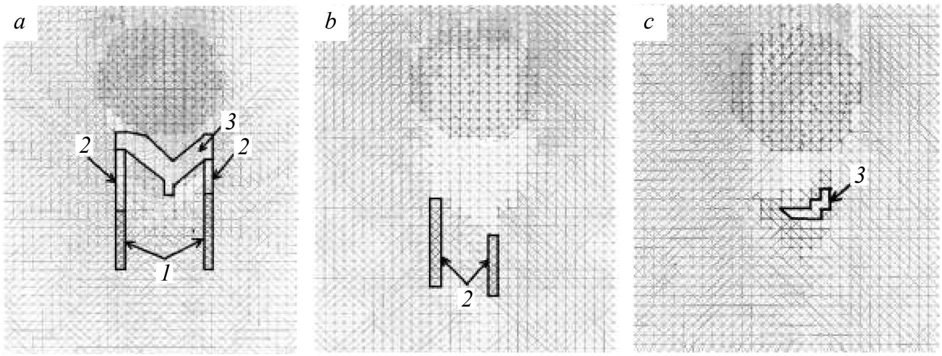


Рис. 7. Разрушение покрытия TiCCaPON, представленное в виде сетки связанных автоматов, на подложке из титана (*a*), сапфира (*b*) и плавленого кварца (*c*); стрелками помечены трещины разного типа: *1* – шевронные трещины до материала переходного слоя, *2* – шевронные трещины до материала подложки, *3* – герцевские трещины до материала подложки

Fig. 7. Fracture of the TiCCaPON coating represented as a grid of bonded automata on the substrates made of (*a*) titanium, (*b*) sapphire, and (*c*) fused silica; the arrows indicate the cracks of different types: *1*, chevron cracks down to the interface layer; *2*, chevron cracks down to the substrate; and *3*, Hertz cracks down to the substrate

При анализе результатов моделирования измерительного царапания системы с подложкой из сапфира (рис. 7, *b*) на втором этапе наблюдаются шевронные трещины до материала переходного слоя с последующим полным отслоением покрытия от материала подложки при силе 42 мН на третьем этапе. В случае системы с подложкой из плавленого кварца (рис. 7, *c*) на втором этапе наблюдаются локальные сколы покрытия до переходного слоя с образованием герцевской трещины до материала подложки, а третьем этапе происходит полное отслоение покрытия при силе 44 мН.

При сравнительном анализе структурных особенностей царапин, а также зависимостей от времени вертикальной составляющей силы и относительного числа несвязанных автоматов было установлено, что в силовом отклике присутствуют скачки сброса силы, характерные для разрушения и отслоения покрытия. Так, на примере указанных зависимостей для системы с подложкой из титана (рис. 8) показано, что начало роста относительного количества несвязанных автоматов, которое характеризует поверхностное разрушение, сопровождается скачком силы. Образование шевронных и герцевских трещин сопровождается ещё большим скачком силы и резким увеличением числа несвязанных автоматов.

Качественно полученные изображения, показанные на рис. 8, соответствуют начальной стадии разрушения покрытия в натурных экспериментах по измерительному царапанию наноструктурных покрытий на различных подложках, описанному в работе [20].

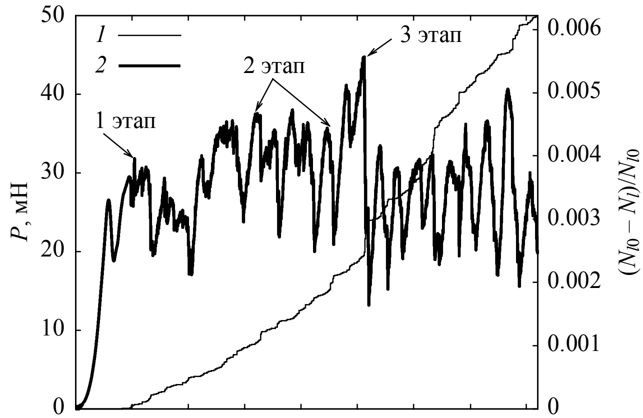


Рис. 8. Зависимости от времени относительного числа несвязанных автоматов N_{l0}–N_l (кр. *1*) и силы *P* (кр. *2*), действующей на индентор со стороны покрытия, расположенного на подложке из наноструктурного титана

Fig. 8. Time dependences of both the relative amount of unlinked automata N_{l0}–N_l (*1*) and force *P* (*2*) acting on the indenter from the side of the coating deposited on the substrate made of nanostructured titanium

Одной из важных извлекаемых характеристик, получаемых при измерительном царапании, является коэффициент трения. В рамках моделирования процесса измерительного царапания значение коэффициента трения между покрытием и индентором определялось на начальной стадии процесса, до разрушения и образования крупных трещин и отслоения покрытия.

Установлено, что на начальной стадии коэффициент трения упрочняющего покрытия на подложках из титана, сапфира и кварца равен 0.04–0.05 (рис. 9), с увеличением глубины царапины коэффициент трения возрастает. В момент начала разрушения поверхностного слоя ($t = 5$ мкс) коэффициент трения для системы, состоящей из упрочняющего покрытия и титановой подложки, составляет 0.25, для системы с сапфировой подложкой – 0.28 и для подложки из плавленого кварца – 0.22 (рис. 9). Рассчитанные значения коэффициента трения соответствуют значениям, полученным в ходе натурного эксперимента [15].

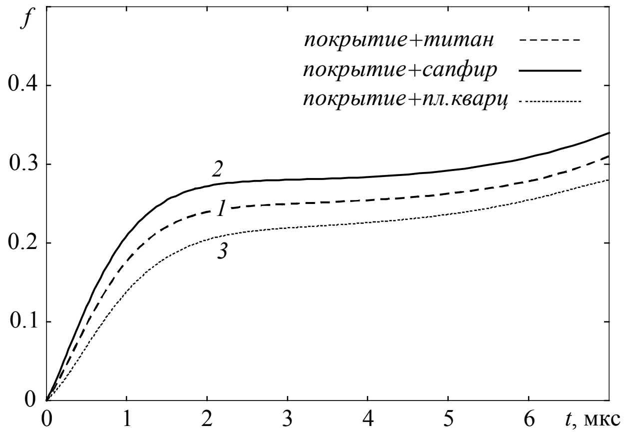


Рис. 9. Зависимость коэффициента трения от времени расчёта для покрытия на различных подложках: наноструктурный титан (кр. *1*), сапфир (кр. *2*); плавленый кварц (кр. *3*)
Fig. 9. Time dependences of the friction coefficients for the coating deposited on different substrates: *1*, Ti; *2*, sapphire; and *3*, fused silica

Заключение

В результате трёхмерного численного моделирования процесса измерительного индентирования системы «покрытие – подложка» было установлено, что свойства материала подложки достаточно существенно влияют на извлекаемые по методу Оливера – Фарра механические характеристики системы «покрытие – подложка» даже при глубинах индентирования менее 1/10 толщины покрытия. Например, значения твёрдости могут отличаться на величину до 10 %. Установлено, что при измерительном царапании системы «покрытие – подложка» в случае оксидных подложек возникает отслоение покрытия, причём при меньшей силе в случае более твёрдой подложки. При царапании упрочняющего покрытия на титановой подложке отслоение не наступает. Значение коэффициента трения между материалом покрытия и контртелом при измерительном царапании зависит от материала подложки и соответствует 0.25 для наноструктурного титана, 0.28 для сапфира и 0.22 для плавленого кварца.

Таким образом, моделирование методом подвижных клеточных автоматов может значительно помочь в интерпретации получаемых данных при исследовании механического поведения систем «покрытие – подложка» при измерительном индентировании и царапании. Применение данного метода численного исследования в сочетании с натурным экспериментом может способствовать разработке новых более точных методик определения механических и трибологических характеристик материала покрытия. В первую очередь это связано с возможностью данного метода адекватно моделировать разрушение материалов.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Oliver W.C.*, *Farr G.M.* Measurement of hardness and elastic modulus by instrumented indentation: Advanced in understanding and refinements to methodology // J. Mater. Res. 2004. V. 19. No. 1. P. 73–78. DOI: 10.1557/jmr.2004.19.1.3.
2. *Шугуров А.Р. Панин А.В.*, *Шестериков Е.В.* Исследование гальванических покрытий AuNi и AuCo методом склерометрии // Письма в ЖТФ. 2011. Т. 37. № 5. С. 64–71.
3. *Lamovec J.*, *Jović V.*, *Aleksić R.*, *and Radojević V.* Micromechanical and structural properties of nickel coatings electrodeposited on two different substrates // J. Serb. Chem. Soc. 2009. V. 74 (7). P. 817–831. DOI: 10.2298/JSC0907817L
4. *Jeng Y.-R.*, *Tan C.-M.*, *Su C.C.*, *Cheng S.-C.*, *and Cheng C.-Y.* Experimental study on the nanoindentation of thin copper films from deep submicron to nano-scale // J. Mechanics. 2012. V. 28. P. 507–511. DOI:10.1017/jmech.2012.60
5. *Vlachos D.E.*, *Markopoulos Y.P.*, *Kostopoulos V.* 3-D Modeling of nanoindentation experiment on a coating-substrate system // Computational Mechanics. 2001. V. 27. P. 138–144. DOI:10.1007/s004660000222
6. *Gamonpilas C.*, *Busso E.P.* On the effect of substrate properties on the indentation behaviour of coated systems // Materials Science and Engineering. 2004. A 380. P. 52–61. DOI: 10.1016/j.msea.2004.04.038.
7. *Ronkainen H.*, *Holmberg K.*, *Laukkanen A.*, *et al.* the effect of coating properties on the performance of a-C:H and TA-C films // Tribologia. 2012.V. 31. No. 3–4. P. 3–35.
8. *Sukumar N.*, *Chopp D.L.*, *and Moran B.* Extended finite element method and fast marching method for three-dimensional fatigue crack propagation // Engineering Fracture Mechanics. 2003. V. 70. P. 29–48. DOI: 10.1016/S0013-7944(02)00032-2.
9. *Perzyński K.*, *Madej Ł.* Numerical modeling of fracture during nanoindentation of the TiN coatings obtained with the PLD process // Bulletin of the Polish Academy of Science. 2013. V. 61. No. 4. P. 973–978. DOI: 10.2478/bpasts-2013-0104.
10. *Abdul-Baqi A.* Indentation-induced interface delamination of a strong film on a ductile substrate // Thin Solid Films. 2001. V. 381. P. 143–154.
11. *Shilko E.V.*, *Psakhie S.G.*, *Schmauder S.*, *et al.* Overcoming the limitations of distinct element method for multiscale modeling of materials with multimodal internal structure // Comp. Mater. Sci. 2015. V.102. P. 267–285. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.02.026.
12. *Cundall P.A.*, *Strack D.L.* A discrete numerical model for granular assemblies // Geotechnique. 1979. V. 29. No. 1. P. 47–165. DOI: 10.1680/geot.1979.29.1.47.
13. *Potyondy D.O.*, *Cundall P.A.* A bonded-particle model for rock // Int. J. Rock Mech. Min. Sci. 2004. V. 41. P. 1329–1364. DOI: 10.1016/j.ijrmms.2004.09.011.
14. *Psakhie S.G.*, *Shilko E.V.*, *Horie Y.*, *et al.* Development of a formalism of movable cellular automaton method for numerical modeling of fracture of heterogeneous elastic-plastic materials // Frattura ed Integrità Strutturale. 2013. V. 24. P. 26–59.
15. *Левашов Е.А.*, *Штанский Д.В.*, *Кирюханцев-Корнеев Ф.В. и др.* Многофункциональные наноструктурные покрытия: получение, структура и обеспечение единства измерений механических и трибологических свойств // Деформация и разрушение материалов. 2009. № 11. С. 19–36.
16. *Левашов Е.А.*, *Петржик М.И.*, *Кирюханцев-Корнеев Ф.В. и др.* Структура и механическое поведение при индентировании биосовместимых наноструктурированных титановых сплавов и покрытий // Металлург. 2012. № 5. С. 79–89.
17. *Levashov E.A.*, *Petrzhik M.I.*, *Kiryukhantsev-Korneev F.V.*, *et al.* Nanostructured titanium alloys and multicomponent bioactive films: Mechanical behavior at indentation // Materials Science and Engineering. 2013. V. 570. P. 51–62. DOI: 10.1016/j.msea.2013.01.034.
18. *Смолин А.Ю.*, *Еремина Г.М.*, *Сергеев В.В. и др.* Трехмерное моделирование методом подвижных клеточных автоматов упруго-пластического деформирования и разруше-

ния покрытий при контактном взаимодействии с жестким индентором // Физическая мезомеханика. 2014. Т.17. №.3. С. 75–76.
19. *Giannakpoulos A.E.*, *Suresh S.* Determination of elastoplasic properties by instrumented sharp indentation // Scripta Materialia. 1999. V. 40. No. 10. P. 1191–1198.
20. *Бычкова М.Я.* Создание государственных стандартных образцов и методик измерения модуля упругости и коэффициента трения для контроля и сертификации наноструктурных покрытий: дис. ... канд. тех. наук: 05.16.06. М., 2015. 131 с.
21. *Elias C.N.*, *Meyers M.A.*, *Valiev R.Z.*, *Monteiro S.N.* Ultrafine grained titanium for biomedical applications: An overview of performance // J. Mater. Res. Technol. 2013. V. 2. No. 4. P. 340–350. DOI: 0.1016/j.jmrt.2013.07.003.
22. *Jong B.H.W.S.*, *Beerkens R.G.C.*, *Nijnatten P. A.* Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry // Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2000. 88 p. DOI: 10.1002/14356007. a12_365.
23. *Dobrovinskaya E.R.*, *Lytvynov L.A.*, *Pishchik V.* Sapphire: material, manufacturing, applications. New York: Springer, 2009. 400 p.

Статья поступила 02.03.2017 г.

Smolin A. Yu., Eremina G. M. NUMERICAL STUDY OF THE INFLUENCE OF SUBSTRATE MATERIAL ON DEFORMATION AND FRACTURE OF THE COATING – SUBSTRATE SYSTEM. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics.* 48. pp. 91–106

DOI 10.17223/19988621/48/9

The experimental techniques such as instrumented indentation and scratch-test are generally used to study mechanical properties of the "coating-substrate" systems. However, technical limitations of a modern equipment cause certain difficulties in the investigation of the systems under consideration. In this paper, the processes of indentation and scratch-testing of the hardened coatings on the various substrates have been studied numerically using the movable cellular automata. The convergence analysis for elastic modulus and yield stress has been carried out to determine the representative volume element. Numerical simulation included explicitly the transition layer and the coating of 200 and 1800 nm in thickness, respectively. The elastic modulus and hardness of the system have been performed as functions of indentation depth after analyzing the simulation results using the method of Oliver and Pharr. It has been found that the substrate has a significant impact on the obtained mechanical characteristics even at the depth of indentation less than 1/10 of the coating thickness. As a result, the modeling of the scratch testing of the coating-substrate system made possible to obtain the scratch images and the time dependences of friction coefficient. Analysis of the results showed that the coating delamination occurred both in the case of oxide substrate and in the case of harder substrate; less strength is required for the latter. Delamination does not occur during the scratching of the hardened coating of titanium substrate. The value of the friction coefficient between the coating material and indenter during the instrumented scratching depends on the substrate material and it is equal to 0.25, 0.28, and 0.22 for nanostructured titanium, sapphire, and fused silica, respectively.

Keywords: nanoindentation, scratch-test, modeling, movable cellular automata method, nanostructured titanium, coatings.

SMOLIN Alexey Yur'evich (Doctor of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation).
E-mail: asmolin@ispms.ru

EREMINA Galina Maksimovna (Candidate of Physics and Mathematics, Institute of Strength Physics and Materials Science of Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Tomsk, Russian Federation).
E-mail: anikeeva@ispms.ru

REFERENCES

1. Oliver W.C., Pharr G.M. (2004) Measurement of hardness and elastic modulus by instrumented indentation: Advances in understanding and refinements to methodology. *J. Mater. Res.* 19(1). pp. 3–20. DOI: 10.1557/jmr.2004.19.1.3.
2. Shugurov A.R., Panin A.V., Shesterikov E.V. (2011) Sclerometric study of galvanic AuNi and AuCo coatings. *Technical Physics Letters*. 37(3). pp. 223–225. DOI: 10.1134/S1063785011030138.
3. Lamovec J., Jović V., Aleksić R. and Radojević V. (2009) Micromechanical and structural properties of nickel coatings electrodeposited on two different substrates. *J. Serb. Chem. Soc*. 74(7). pp. 817–831. DOI: 10.2298/JSC0907817L.
4. Jeng Y.R., Tan C.M., Su C.C., Cheng S.C., Cheng C.Y. (2012) Experimental study on the nanoindentation of thin copper films from deep submicron to nano-scale. *Journal of Mechanics*. 28. pp. 507–511. DOI:10.1017/jmech.2012.60.
5. Vlachos D.E., Markopoulos Y.P., Kostopoulos V. (2001) 3-D Modeling of nanoindentation experiment on a coating-substrate system. *Computational Mechanics*. 27. pp. 138–144. DOI: 10.1007/s004660000222.
6. Gamonpilas C., Busso E.P. (2004) On the effect of substrate properties on the indentation behaviour of coated systems. *Materials Science and Engineering*. A380. pp. 52–61. DOI:10.1016/j.msea.2004.04.038.
7. Ronkainen, H., Holmberg, K., Laukkanen, A., Andersson, T., Kano, M., Horiuchi, T., Suzuki T. (2012) The effect of coating properties on the performance of a-C:H and TA-C films. *Tribologia*. 31(3–4). pp. 3–35.
8. Sukumar N., Chopp D. L, Moran B. (2003) Extended finite element method and fast marching method for three-dimensional fatigue crack propagation. *Engineering Fracture Mechanics*. 70. pp.29–48. DOI: 10.1016/S0013-7944(02)00032-2.
9. Perzyński K., Madej Ł. (2013) Numerical modeling of fracture during nanoindentation of the TiN coatings obtained with the PLD process. *Bulletin of the Polish Academy of Science*. 61(4). pp. 973–978. DOI: 10.2478/bpasts-2013-0104.
10. Abdul-Baqi A. (2001) Indentation-induced interface delamination of a strong film on a ductile substrate. *Thin Solid Films*. 381. pp. 143–154.
11. Shilko E.V., Psakhie S.G., Schmauder S., Popov V.L., Astafurov S.V., Smolin A.Yu. (2015) Overcoming the limitations of distinct element method for multiscale modeling of materials with multimodal internal structure. *Comp. Mater. Sci*. 102. pp. 267–285. DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.02.026.
12. Cundall P.A., Strack D.L. (1979) A discrete numerical model for granular assemblies. *Geotechnique*. 29(1). pp. 47–165. DOI: 10.1680/geot.1979.29.1.47.
13. Potyondy D.O., Cundall P.A. (2004) A bonded-particle model for rock. *Int. J. Rock Mech. Min. Sci.* 41. pp. 1329–1364. DOI: 10.1016/j.ijrmms.2004.09.011.
14. Psakhie S.G., Shilko E.V., Horie Y., Smolin A.Yu., Astafurov S.V. (2013) Development of a formalism of movable cellular automaton method for numerical modeling of fracture of heterogeneous elastic-plastic materials. *Frattura ed Integrità Strutturale*. 24. pp. 26–59. DOI: 10.3221/IGF-ESIS.24.04.
15. Levashov E.A., Shtanskiy D.V., Kiryukhantsev-Korneev F.V., Petrzhik M.I., Tyurina M.Ya., Sheveyko A.N. (2010) Multifunctional nanostructured coatings: Formation, structure, and the uniformity of measuring their mechanical and tribological properties. *Russian Metallurgy* (*Metally*). 10. pp. 917–935. DOI: 10.1134/S0036029510100113.
16. Levashov E.A., Petrzhik M.I., Kiryukhantsev-Korneev F.V., Shtanskiy D.V., Prokoshkin S.D., Gunderov D.V., Sheveyko A.N., Korotitskiy A.V., Valiev R.Z. (2012) Structure and mechanical behavior during indentation of biocompatible nanostructure titanium alloys and coatings. *Metallurgist.* 2012. 56(5–6). pp. 395–407. DOI: 10.1007/s11015-012-9589-5.
17. Levashov E.A., Petrzhik M.I., Kiryukhantsev-Korneev F.V., Shtanskiy D.V., Sheveyko A.N., Valiev R.Z., Gunderov D.V., Prokoshkin S.D., Korotitskiy A.V., Smolin A.Yu. (2013) Nanostructured titanium alloys and multicomponent bioactive films: Mechanical behavior at

indentation. *Materials Science and Engineering*. 570. pp. 51–62. DOI: 10.1016/j.msea. 2013.01.034.
18. Smolin A.Yu., Eremina G.M., Sergeev V.V., Shil'ko E.V., Psakhie S.G. (2014) Three-dimensional MCA simulation of elastoplastic deformation and fracture of coatings in contact interaction with a rigid indenter. *Physical Mesomechanics.* 17(4). pp. 292–303. DOI: 10.1134/S1029959914040067.
19. Giannakpoulos A.E., Suresh S. (1999) Determination of elastoplasic properties by instrumented sharp indentation. *Scripta Materialia*. 40(10). pp. 1191–1198.
20. Bychkova M.Ya. (2015) *Sozdanie gosudarstvennykh standartnykh obraztsov i metodik izmereniya modulya uprugosti i koeffitsienta treniya dlya kontrolya i sertifikatsii nanostrukturnykh pokrytiy* [Creation of state standard samples and measurement techniques for elastic modulus and friction coefficient in order to control and certificate nanostructured coatings]. Dissertation for Cand.Tech. Sciences. Moscow. 131 p.
21. Elias C.N., Meyers M.A., Valiev R.Z., Monteiro S.N. (2013) Ultrafine grained titanium for biomedical applications: An overview of performance. *J Mater. Res. Technol*. 2(4). pp. 340–350. DOI: 0.1016/j.jmrt.2013.07.003.
22. Jong B.H.W.S., Beerkens R.G.C., Nijnatten P.A. (2000) Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry.*Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA*. 88 p. DOI: 10.1002/14356007.a12_365.
23. Dobrovinskaya E.R., Lytvynov L.A., Pishchik V. (2009) *Sapphire: material*, *manufacturing*, *applications*. New York: Springer. 400 p.

УДК 532.529:532.73-1
DOI 10.17223/19988621/48/10

В.Ш. Шагапов, А.С. Чиглинцева, Г.Р. Рафикова

О КВАЗИСТАЦИОНАРНОМ РЕШЕНИИ УРАВНЕНИЯ ДИФФУЗИИ ГАЗА В ГИДРАТНОМ СЛОЕ[1]

Решена задача об образовании гидратного слоя в сферической частице, ядро которой состоит из фазы воды (или льда), в диффузионном режиме, который предполагает диффузию подвижного газа в слое гидрата метана, образующегося на границе контакта газ–лед (или вода). Выявлена динамика роста гидратного слоя в сферической частице в зависимости от плотности насыщения подвижного газа. Показано, что в достаточно широких пределах растворимости газа в составе гидрата, зависящей от давления, численное решение уравнения диффузии достаточно хорошо совпадает с его аналитическим решением. Это позволяет описать интенсивность гидратообразования, используя квазистационарное решение уравнения диффузии газа в гидратном слое к границе контакта гидрат–лед (или вода).

Ключевые слова: *диффузия газа*, *плотность насыщения*, *безразмерные параметры*, *гидратный слой*, *метод ловли фронта.*

На сегодняшний день большое внимание исследователей приковано к газовым гидратам, рассматриваемых, с одной стороны, как источник энергетического сырья, хранящего в себе большие объемы углеводородных газов, а с другой – как хранилище, в котором может быть законсервирован газ. Так, например, в одном кубическом метре газового гидрата содержится до 170 м^3 метана и 0.8 м^3 пресной воды.

Большинство исследователей отмечают, что технологии хранения и транспортировки газа в газогидратном состоянии позволяют утилизировать попутный и нефтяной газ непосредственно на промыслах, а также хранить и транспортировать радиоактивные и парниковые газы, обеспечить беструбную газификацию, увеличить концентрацию хранения газа и его компактность [1–3]. Авторами [2] предложен метод возможности создания подземного хранилища природного газа в гидратном состоянии в подмерзлотных водоносных горизонтах. Построена [4] математическая модель нагнетания холодного газа в пласт, в исходном состоянии насыщенный снегом и газом, сопровождаемого гидратообразованием. Получено условие, при котором существует максимальный нагрев системы «газ + снег + гидрат», обеспечивающий полный переход снега в гидратное состояние. Таким образом, в естественных условиях, например в подземных залежах, можно создать хранилища, в которых будет законсервирован газ достаточно больших объемов, чем в резервуарах с «чистым» газом.

В природных условиях газогидраты могут образовываться как в донных отложениях морей и океанов, так и в подземных залежах в поровом пространстве пород при положительных и отрицательных температурах [5–7]. Согласно лабораторным экспериментам, установлено, что образование гидрата метана и диоксида

[1] Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №15-11-20022).

углерода из полидисперсного порошка ледяных сферических частиц при отрицательных температурах происходит в две стадии: зарождение и рост гидратных пятен на поверхности ледяных частиц и затем последующий рост гидратной оболочки, лимитирующейся диффузией газа через гидратный слой к ледяному ядру [8–10]. Авторами [8–10] экспериментально установлено, что основным механизмом образования гидрата при отрицательной температуре является диффузия газа через образующийся гидратный слой к границе контакта лед – гидрат. Диффузионная теория образования пористого газового гидрата из ледяного порошка описана в работах [11–13]. Из сравнения экспериментальных и расчетных данных оценены эмпирические параметры теоретической модели, которые отвечают за диффузионную кинетику процесса образования гидрата метана. Имеющиеся экспериментальные данные показывают возможность образования гидратной корки на поверхности всплывающих газовых пузырьков на больших глубинах в области высокого гидростатического давления, которое может приводить к значительному росту времени растворения газа в морской воде при их всплытии [14].

Таким образом, анализ исследований показал, что картины процесса образования гидратного слоя весьма разнообразны. В одних экспериментах наблюдается быстрый рост, в других – достаточно медленный темп роста гидратного слоя. Все это объясняется тем, что интенсивность его образования зависит от различных факторов: начальных условий всплытия пузырьков, качества и состояния воды, «чистоты» гидратообразующего газа, от содержания в них примесных частиц, солей, спиртов, капиллярных добавок, а также от воздействия различными физическими полями (магнитные поля, ударные волны, например), различных методов перемешивания гидратообразующих веществ и организации отвода тепла. Таким образом, возможные различные лимитирующие механизмы, которые определяют интенсивность роста гидратного слоя при контакте газа и воды (или льда) при определенных термобарических условиях. Здесь следует отметить, что большинство рассмотренных моделей содержат ряд эмпирических параметров, отвечающих за кинетику гидратообразования, которые вообще говоря, неизвестны и требуют определения.

Помимо экспериментального изучения данных процессов необходимо отметить серию работ [15–19], в которых построены математические модели процесса образования гидрата с использованием диффузионной кинетики, предполагающей диффузию газа через образующийся гидратный слой к границе контакта вода – гидрат и газ – гидрат. В этих работах было получено и использовано квазистационарное решение уравнения диффузии газа в слое гидрата, для определения интенсивности образования гидрата. Здесь следует отметить, что принятая в работах схема гидратообразования позволяет описать процесс перехода воды и газа в гидратное состояние введением лишь одного эмпирического параметра, имеющего размерность коэффициента диффузии. В работе [19] проведено теоретическое исследование процесса вытеснения метана из газогидратного пласта путем закачки углекислого газа в пласт, с последующим замещением метана из состава гидрата двуокисью углерода. Рассмотрен случай, когда интенсивность образования гидрата диоксида углерода лимитируется диффузией углекислого газа через образовавшийся гидратный слой между потоком газовой смеси и гидратом метана. Исследована динамика основных параметров процесса и расходов закачиваемого и выходящего углекислого газа и добываемого метана.

Причем такая кинетика в плане описания качественной и количественной картины процесса образования гидрата неплохо согласуется с опытными данными и теоретическими расчетами по описанным моделям в работах [8–10, 14] и исчерпывает множество заранее неизвестных эмпирических параметров, которые требуют определения.

Целью данной работы является изучение динамики роста гидратного слоя на границе контакта газ – вода (или лед) в сферической частице с использованием диффузионной кинетики, а также сравнение численного решения уравнения диффузии с его аналитическим решением.

Постановка задачи и основные уравнения

Рассмотрим одиночную гидратную сферическую частицу с внешним радиусом a, ядро которой состоит из водной (или ледяной) фазы с радиусом a_s, находящейся в газовой фазе, схема которой показана на рис. 1.

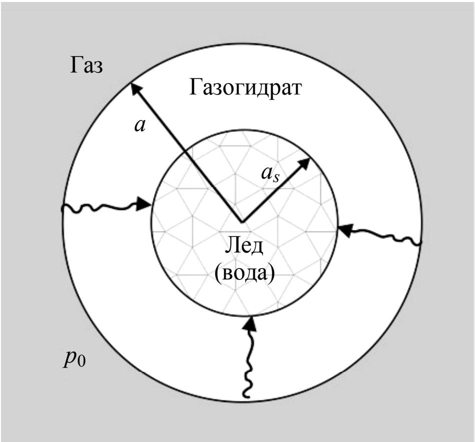


Рис. 1. Схема образования гидратной частицы
Fig. 1. Scheme of the hydrate particle formation

Полагаем, что скорость образования гидрата лимитируется диффузией газа через образовавшийся гидратный слой к границе контакта гидрат – вода (или лед). Газ, находящийся в составе гидрата с массовой концентрацией G, будем называть неподвижным. Газ со средней плотностью ρ'_g в гидрате будем называть диффундирующим газом.

В общем случае, для процесса переноса подвижного газа через гидратный слой, с внешним радиусом a и внутренним радиусом a_s, запишем уравнение диффузии [20]

$$\frac{\partial \rho'_g}{\partial t} = \frac{D_g}{r^2} \frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial \rho'_g}{\partial r} \right) \quad (a_s < r < a), \tag{1}$$

где D_g – коэффициент диффузии газа через гидратную корку.

Квазистационарное решение уравнения диффузии, полагая, что $\partial \rho'_g / \partial t = 0$, при следующих граничных условиях:

$$\rho'_g = \rho_{g(s)}, \ r = a; \ \rho'_g = 0, \ r = a_s \tag{2}$$

имеет вид
$$\rho'_g = \frac{\rho_{g(s)}\left(r - a_s\right)}{r\left(1 - \dfrac{a_s}{a}\right)}, \tag{3}$$

где $\rho_{g(s)}$ – плотность насыщения подвижного газа в составе гидрата. Здесь первое условие в выражении (2) означает, что вблизи внутренней границы гидратного слоя реализуется некоторое насыщение гидрата газом со значением плотности $\rho_{g(s)}$, второе условие означает мгновенный переход подвижного газа в состав гидрата при достижении границы контакта с фазой воды (или льда).

Величина $\rho_{g(s)}$ в формуле (3) по аналогии с законом Генри [21] может быть задана пропорционально давлению или плотности газа в ядре частицы как
$$\rho_{g(s)} = R_{g(s)} p_g \,. \tag{4}$$

Запишем выражение для потока массы газа к поверхности контакта между водой (или льдом) и гидратом, отнесенного на единицу площади водного (или ледяного) сферического шарика [22]
$$j_g = -D_g \left(\frac{\partial \rho'_g}{\partial r}\right)_{a_s} . \tag{5}$$

Подставляя в (5) решение (3), получим выражение для интенсивности потребления газа идущего на образование гидрата, отнесенное на единицу площади водного (или ледяного) ядра:
$$j_g = \frac{D_g \rho_{g(s)}}{a_s\left(1 - \dfrac{a_s}{a}\right)} .$$

Уравнение для изменения радиуса водного (или ледяного) ядра a_s гидратной частицы запишем в виде
$$\frac{\partial a_s}{\partial t} = \frac{j_g}{\rho_h G} . \tag{6}$$

Подставляя выражение (5) в (6), получим
$$\frac{\partial a_s}{\partial t} = -\frac{D_g}{\rho_h G}\left(\frac{\partial \rho'_g}{\partial r}\right)_{a_s} . \tag{7}$$

Введем следующие безразмерные параметры для концентрации растворенного газа в слое гидрата, времени и координаты границы образования гидрата:
$$k_g = \frac{\rho'_g}{\rho_{g(s)}}, \;\; \tau = \frac{t}{a^2 / D_g}, \;\; R = \frac{r}{a}, \;\; A_s = \frac{a_s}{a}. \tag{8}$$

Тогда уравнения (1), (7) и граничные условия (2) соответственно примут вид
$$\frac{\partial k_g}{\partial \tau} = \frac{1}{R^2}\frac{\partial}{\partial R}\left(R^2 \frac{\partial k_g}{\partial R}\right), \;\; 0 < R < 1 ; \tag{9}$$

$$\frac{\partial A_s}{\partial \tau} = -\tilde{\rho}\left(\frac{\partial k_g}{\partial R}\right)_{A_s} , \;\; \tilde{\rho} = \frac{\rho_{g(\mathrm{s})}}{\rho_h G} , \tag{10}$$

$$k_g = 0, \; R = A_s; \;\; k_g = 1, \; R = 1 \; .$$

Квазистационарное решение $\partial K_g / \partial \tau = 0$ уравнения диффузии (9) в безразмерных переменных примет вид

$$k_g = \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{A_s}\right)\frac{1}{\left(1 - \frac{1}{A_s}\right)}.$$

Тогда уравнение (10) запишется как

$$\frac{dA_s}{d\tau} = \frac{\tilde{\rho}}{A_s^2\left(1 - \frac{1}{A_s}\right)}. \qquad (11)$$

Из аналитического решения уравнения (11) получим время полного перехода воды (или льда) $(A_s = 0)$ в гидратное состояние

$$\tau = \frac{1}{6\tilde{\rho}}. \qquad (12)$$

Численный анализ

Полученные уравнения будем решать методом ловли фронта в узел пространственной сетки [23]. Для этого введем равномерную пространственную сетку $R_i = (i-1)h,\ i = 1,\ldots,N$ с шагом $h = 1/(N-1)$ по координате и неравномерную временную сетку $\tau_{n+1} = \tau_n + \Delta\tau_{n+1},\ n \geq 0$ с шагом $\Delta\tau_{n+1} > 0$. Шаг по времени $\Delta\tau_{n+1}$ выбирается таким образом, чтобы за промежуток времени (от τ_n до τ_{n+1}) граница контакта газ–вода (или лед), на которой происходит образование гидрата, сдвинулась ровно на один шаг по пространственной сетки, то есть

$$\frac{dA_s}{d\tau} \approx \frac{h}{\Delta\tau}. \qquad (13)$$

Для записи уравнения (9) в сферических координатах в конечно-разностном виде воспользуемся неявной четырехточечной схемой:

$$\frac{k_{gi}^{\,n+1} - k_{gi}^{\,n}}{\Delta\tau_{i+1}} = \frac{1}{R_i^2 h^2}\left[R^2_{i+\frac{1}{2}} k_{gi+1}^{\,n+1} - \left(R^2_{i+\frac{1}{2}} + R^2_{i-\frac{1}{2}}\right)k_{gi}^{\,n+1} + R^2_{i-\frac{1}{2}} k_{gi-1}^{\,n+1}\right], \qquad (14)$$

где
$$R_{i+\frac{1}{2}} = \frac{R_{i+1} + R_i}{h},\ R_{i-\frac{1}{2}} = \frac{R_i + R_{i-1}}{h}.$$

Полученная система сводится к следующему общему виду:

$$A_i k_{gi+1}^{\,n+1} - B_i k_{gi}^{\,n+1} + C_i k_{gi+1}^{\,n+1} = F_i, \qquad (15)$$

где
$$A_i = \frac{R^2_{i+1/2}}{R_i^2 h^2},\ B_i = \frac{R^2_{i+1/2} + R^2_{i-1/2}}{R_i^2 h^2} + \frac{1}{\Delta\tau_{i+1}},\ C_i = \frac{R^2_{i-1/2}}{R_i^2 h^2},\ F_i = -\frac{k_{gi}^{\,n}}{\Delta\tau_{i+1}}.$$

Решение системы уравнений (15) осуществляется методом прогонки:

$$k_{gi}^{\,n+1} = \alpha_i k_{gi+1}^{\,n+1} + \beta_i,$$

где прогоночные коэффициенты вычисляются согласно следующим выражениям:

$$\alpha_i = A_i / (B_i - C_i\alpha_{i-1}), \quad \beta_i = (C_i\beta_{i-1} - F_i)/(B_i - C_i\alpha_{i-1}).$$

Шаг по времени $\Delta\tau_{n+1}$ вычисляется согласно условию (13):

$$\Delta\tau_{n+1} = \frac{\rho_h G h^2}{\rho_{g(s)}\left(k_{gi}^{\,n} - k_{gi-1}^{\,n}\right)}.$$

Процесс итераций для полей концентраций на каждом временном слое осуществляется до достижения заданной точности, затем переход осуществляется на следующий временной слой.

Результаты расчетов

В качестве газа рассматривался метан, с массовой концентрацией $G = 0.12$ в составе гидрата. Плотность насыщения подвижного газа в составе гидрата $\rho_{g(s)}$, согласно выражению (4), принималась равной 4 кг/м^3, которая соответствует давлению 10 МПа.

На рис. 2 представлена эволюция полей концентрации диффундирующего газа через гидратный слой, возникающий на границе контакта газ–вода (или лед). Числа на кривых соответствуют безразмерному времени $\tilde{t}$. Из графика видно, что наиболее интенсивное образование гидратного слоя происходит на начальном временном этапе, в дальнейшем процесс несколько замедляется.

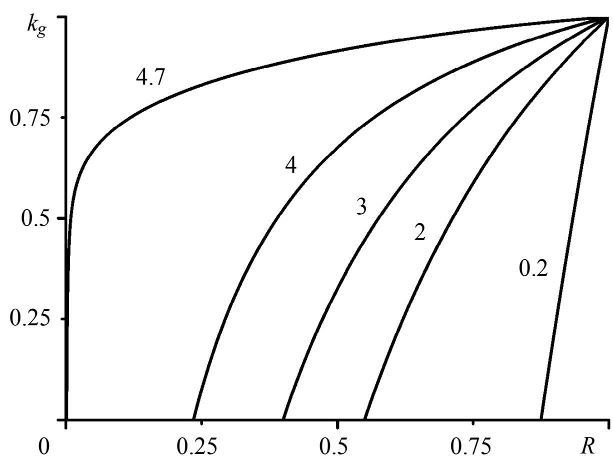


Рис. 2. Эволюция полей концентраций подвижного газа в гидратном слое
Fig. 2. Evolution of diffusing gas concentration fields in a hydrate layer

На рис. 3 линиями *1*, *2* и *3* представлена динамика движения границы A_S, на которой происходит образование гидрата, от безразмерного времени $\tilde{t}$ при различных значениях плотности насыщения газа $\rho_{g(s)} = 2$, 4 и 8 кг/м^3. Здесь и далее сплошная линия соответствует численному решению уравнения диффузии, штриховая – квазистационарному. Видно, что при различных значениях $\rho_{g(s)}$ оба решения уравнения диффузии подвижного газа в слое гидрата неплохо согласуются меду собой.

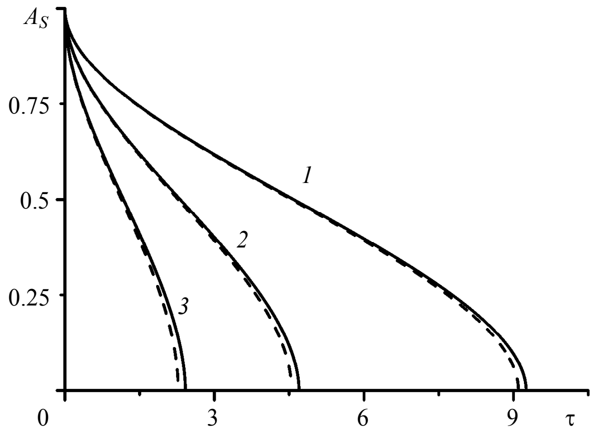


Рис. 3. Динамика движения границы образования гидрата A_S от безразмерного времени $\tilde{t}$ при различной плотности насыщения диффундирующего газа (кр. *1* – $\rho_{g(s)}$, кг/м^3 = 2, кр. *2* – 4, кр. *3* – 8)

Fig. 3. Dynamics of the movement of hydrate formation boundary as a function of dimensionless time $\tilde{t}$ at various saturation density of the diffusing gas ($\rho_{g(s)}$ [kg/m^3] = (*1*) 2, (*2*) 4, and (*3*) 8)

Зависимость безразмерного времени полного перехода воды (или льда) в состав гидрата от параметра $\tilde{\rho}$ приведена на рис. 4. Видно, что численное решение уравнения диффузии достаточно хорошо согласуется с его аналитическим решением в широком диапазоне значений параметра $\tilde{\rho}$, который зависит от плотности насыщения газа.

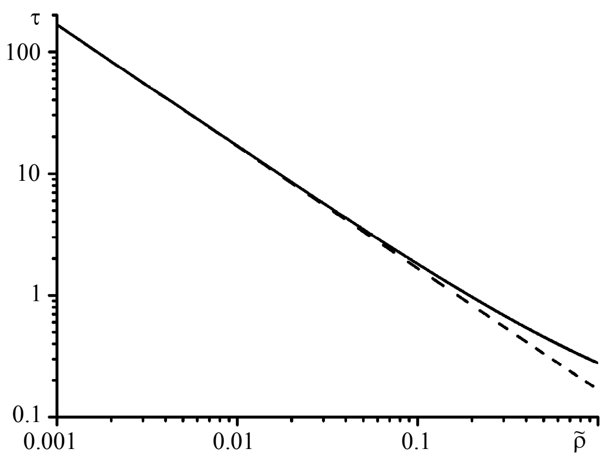


Рис. 4. Зависимость времени полного перехода воды (или льда) в состав гидрата от параметра $\tilde{\rho}$

Fig. 4. The time of water (or ice) total transition into the hydrate structure as a function of parameter $\tilde{\rho}$

Заключение

Исследована динамика роста гидратного слоя в зависимости от плотности насыщения диффундирующего газа в сферической частице, ядро которой состоит из фазы воды (или льда). Показано, что в достаточно широких пределах плотности насыщения подвижного газа, зависящей от текущего давления, аналитическое решение уравнение диффузии достаточно хорошо совпадает с его численным решением. Поэтому, квазистационарное решение уравнения диффузии позволяет описать процесс образования гидратного слоя, образующегося на границе контакта газ–снег (или вода).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Бондарев Э.А.*, *Рожин И.И.*, *Попов В.В.*, *Аргунова К.К.* Оценка возможности подземного хранения гидратов природного газа в зоне многолетней мерзлоты // Криосфера Земли. 2015. Т. XIX. № 4. С. 64–74.
2. *Дучков А.Д.*, *Соколова Л.С.*, *Аюнов Д.Е.*, *Пермяков М.Е.* Оценка возможности захоронения углекислого газа в крио-литозоне Западной Сибири // Криосфера Земли. 2009. Т. XIII. № 4. С. 62–68.
3. *Шагапов В.Ш.*, *Мусакаев Н.Г.* Динамика образования и разложения гидратов в системах добычи, транспортировки и хранения газа. М.: Наука, 2016. 240 с.
4. *Шагапов В.Ш.*, *Чиглинцева А.С.*, *Русинов А.А.* Задача о нагнетании холодного газа в пласт насыщенный снегом и газом, сопровождаемое гидратообразованием // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2016. № 3(41). С. 98–106. DOI 10.17223/19988621/41/10.
5. *Чувилин Е.М.*, *Козлова Е.В.* Исследования формирования мерзлых гидратосодержащих пород // Криосфера Земли. 2005. № 1. С. 73–80.
6. *Chuvilin E.M.*, *Kozlova E.V.*, *Makhonina N.A.*, *Yakushev V.S.* Experimental investigation of gas hydrate and ice formation in methane saturated sediments // Proc. 8th International Conference on Permafrost. 2003. P. 145–150.
7. *Чувилин Е.М.*, *Гурьева О.М.* Экспериментальное изучение образования гидратов CO_2 в поровом пространстве промерзающих и мерзлых пород // Криосфера Земли. 2009. Т. 13. № 3. С. 70–79.
8. *Staykova D.K.*, *Hansen T*, *Salamatin A.N.*, *Kuhs W.F.* Kinetic diffraction experiments on the formation of porous gas hydrates // Proc. Fourth International Conference on Gas Hydrates. Yokohama, May 19–23, 2002. P. 537–542.
9. *Kuhs W.F.*, *Staykova D.K.*, *Salamatin A.N.* Formation of methane hydrate from polydisperse ice powders // J. Phys. Chem. B. 2006. V. 110. No. 26. P. 13283–13295. DOI: 10.1021/ jp061060f.
10. *Falenty A.*, *Salamatin A. N.*, *Kuhs W. F.* Kinetics of CO_2-Hydrate Formation from Ice Powders: Data Summary and Modeling Extended to Low Temperatures // J. Phys. Chem. C. 2013. V. 117. P. 8443–8457. DOI: 10.1021/jp310972b.
11. *Власов В.А.* Диффузионно-феноменологическая теория образования газового гидрата из ледяного порошка // Теоретические основы химической технологии. 2012. Т. 46. № 6. С. 612–619. DOI: 10.1134/S0040579512060243.
12. *Xiaoping Wang*, *Arthur J. Schultz*, *and Yuval Halpern* Kinetics of methane hydrate formation from polycrystalline deuterated ice // J. Phys. Chem. A. 2002. V. 106. No. 32. P. 7304–7309. DOI: 10.1021/jp025550t.
13. *Liu W.*, *Li Q.*, *Song Y.*, *et al.* Diffusion theory of formation of gas hydrate from ice powder without melting // Energy Procedia. 2014. V. 61. P. 513–522.
14. *McGinnis D.F.*, *Greinert J.*, *Artemov Y.*, *Beaubien S.* Fate of rising methane bubbles in stratified waters: How much methane reaches the atmosphere? // J. Geophysical Research. 2006. V. 111. P. 382–386. DOI: 10.1029/2005JC003183.
15. *Гумеров Н.А.* Автомодельный рост слоя газового гидрата, разделяющего газ и жидкость // Изв. РАН. Механика жидкости и газа. 1992. № 5. С.78–85.

16. *Шагапов В.Ш.*, *Чиглинцева А.С.*, *Кунсбаева Г.А.* Теоретические основы процесса нагнетания газа и капель воды в трубчатый реактор в условиях гидратообразования// Вестник Казанского государственного технического университета им. А.Н. Туполева. 2015. № 5(81). С. 36–44.
17. *Шагапов В.Ш.*, *Чиглинцева А.С.*, *Русинов А.А.* О механизмах роста гидратной оболочки на поверхности всплывающих газовых пузырьков // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2015. № 3(35). С. 73–86. DOI: 10.17223/19988621/35/10.
18. *Шагапов В.Ш.*, *Рафикова Г.Р.*, *Хасанов М.К.* К теории образования газогидрата в частично водонасыщенной пористой среде при нагнетании метана // Теплофизика высоких температур. 2016. Т. 54. № 6. С. 911–920. DOI: 10.7868/S004036441606017X.
19. *Шагапов В.Ш.*, *Хасанов М.К*, *Рафикова Г.Р.* Вытеснение метана из газогидратного пласта при закачке диоксида углерода // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2016. № 6(44). С. 104–116. DOI: 10.17223/19988621/44/9.
20. *Рудобашта С.П.*, *Карташов Э.М.* Диффузия в химико-технологических процессах: учебное пособие. 2-е изд., перераб. и доп. М.: КолосС, 2009. 478 с.
21. *Намиот А.Ю.* Растворимость газов в воде. М.: Недра, 1981. 167 с
22. *Нигматуллин Р.И.* Динамика многофазных сред: в 2 ч. М.: Наука, 1987.
23. *Кузнецов Г.В.*, *Шеремет М.А.* Разностные методы решения задач теплопроводности: учебное пособие. Томск: Изд-во ТПУ, 2007. 172 с.

Статья поступила 30.12.2016 г.

Shagapov V.Sh., Chiglintseva A.S., Rafikova G.R. ON QUASISTATIONARY SOLUTION OF THE EQUATION OF GAS DIFFUSION IN HYDRATE LAYER. *Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 48. pp. 107–117

DOI 10.17223/19988621/48/10

In this paper, the problem of hydrate layer formation in a spherical particle whose core consists of the water (or ice) phase in a diffusion mode that involves the mobile gas diffusion in the bed of methane hydrate formed at the interface between gas and ice (or water) is solved. A quasistationary solution of the gas diffusion equation is obtained. The time of total water (or ice) transition in the hydrate state is determined. Distributions of diffusing gas concentration fields by coordinate passing through the hydrate layer, which arises on the gas–water (or ice) interface, are obtained. The growth dynamics of the hydrate layer in a spherical particle in relation to the saturation density of mobile gas is revealed. It is established that an increase in saturation density of the diffusing gas by four times leads to a decrease in dimensionless time of total water (or ice) transition in the hydrate state by three times. It is shown that in rather wide limits of the solubility of gas as a part of hydrate depending on the pressure, the numerical solution of the diffusion equation coincides well with its analytical solution.

Keywords: gas diffusion, saturation density, dimensionless parameters, hydrate layer, front-tracking method.

SHAGAPOV Vladislav Shaikhulagzamovich (Doctor of Physics and Mathematics, Institute of Mechanics and Engineering, Kazan Science Center, Russian Academy of Sciences, Kazan, Russian Federation; Institute of Mechanics of Ufa Branch, RAS, Ufa, Russian Federation)
E-mail: shagapov@rambler.ru

CHIGLINTSEVA Angelina Sergeevna (Candidate of Physics and Mathematics, Institute of Mechanics and Engineering, Kazan Science Center, Russian Academy of Sciences, Kazan, Russian Federation; Birsk Branch of Bashkir State University, Birsk, Russian Federation)
E-mail: changelina@rambler.ru

RAFIKOVA Guzal Rinatovna (Candidate of Physics and Mathematics, Institute of Mechanics, Ufa Science Center, RAS, Ufa, Russian Federation)
E-mail: rafikova_guzal@mail.ru

REFERENCES

1. Bondarev E.A., Rozhin I.I., Popov V.V., Argunova K.K. (2015) Otsenka vozmozhnosti podzemnogo khraneniya gidratov prirodnogo gaza v zone mnogoletney merzloty [Assessment of possibility of natural gas hydrates underground storage in permafrost regions]. *Kriosfera Zemli – Earth Cryosphere*. XIX(4). pp. 64–74.
2. Duchkov A.D., Sokolova L.S., Ayunov D.E., Permyakov M.E. (2009) Otsenka vozmozhnosti zakhoroneniya uglekislogo gaza v krio-litozone Zapadnoy Sibiri [Assesment of potential of west siberian permafrost for the carbon dioxide storage]. *Kriosfera Zemli – Earth Cryosphere*. XIII(4). pp. 62–68.
3. Shagapov V.Sh., Musakaev N.G. (2016) Dinamika obrazovaniya i razlozheniya gidratov v sistemakh dobychi, transportirovki i khraneniya gaza [Dynamics of formation and decomposition of the hydrates in the systems of production, transportation, and storage of the gas]. Moscow: Nauka.
4. Shagapov V.Sh., Chiglintseva A.S., Rusinov A.A. (2016) Zadacha o nagnetanii kholodnogo gaza v plast nasyshchennyy snegom i gazom, soprovozhdaemom gidratoobrazovaniem [The problem of cold gas injection into the reservoir saturated with snow and gas, accompanied by the hydrate formation process]. *Vestnik Tomskogo Gosudarstvennogo Universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics.* 3(41). pp. 98–106. DOI: 10.17223/19988621/41/10.
5. Chuvilin E.M., Kozlova E.V. (2005) Issledovaniya formirovaniya merzlykh gidratosoderzhashchikh porod [Research of formation of frozen gas hydrate-saturated sediment]. *Kriosfera Zemli – Earth Cryosphere*. 1. pp. 73–80.
6. Chuvilin E.M., Kozlova E.V., Makhonina N.A., Yakushev V.S. (2003) Experimental investigation of gas hydrate and ice formation in methane saturated sediments. *Proceedings of 8th International Conference on Permafrost.* pp. 145–150.
7. Chuvilin E.M., Gur'eva O.M. (2009) Eksperimental'noe izuchenie obrazovaniya gidratov CO_2 v porovom prostranstve promerzayushchikh i merzlykh porod [Experimental investigation of CO_2 gas hydrate formation in porous media of frozen and freezing sediments]. *Kriosfera Zemli – Earth Cryosphere.* 13(3). pp. 70–79.
8. Staykova D.K., Hansen T., Salamatin A.N., Kuhs W.F. (2002) Kinetic diffraction experiments on the formation of porous gas hydrates. *Proceedings of the Fourth International Conference on Gas Hydrates*. Yokohama. May. pp. 537–542.
9. Kuhs W.F., Staykova D.K., Salamatin A.N. (2006) Formation of methane hydrate from polydisperse ice powders. *Journal of Physical Chemistry.* B. 110(26). pp. 13283–13295. DOI: 10.1021/jp061060f.
10. Falenty A., Salamatin A.N., Kuhs W.F. (2013) Kinetics of CO_2-hydrate formation from ice powders: data summary and modeling extended to low temperatures. *Journal of Physical Chemistry.* C. 117. pp. 8443–8457. DOI: 10.1021/jp310972b.
11. Vlasov V.A. (2012) Phenomenological diffusion theory of formation of gas hydrate from ice powder. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering.* 46(6). pp. 576–582. DOI: 10.1134/S0040579512060243.
12. Xiaoping Wang, Arthur J. Schultz, and Yuval Halpern (2002) Kinetics of methane hydrate formation from polycrystalline deuterated ice. *Journal of Physical Chemistry.* A. 106(32) pp. 7304–7309. DOI: 10.1021/jp025550t.
13. Liu W., Li Q., Song Y., Zhang L., Yang M., Wang L., Chen Y. (2014) Diffusion theory of formation of gas hydrate from ice powder without melting. *Energy Procedia.* 61. pp. 513– 22.
14. McGinnis D.F., Greinert J., Artemov Y., Beaubien S. (2006) Fate of rising methane bubbles in stratified waters: How much methane reaches the atmosphere? *Journal of Geophysical Research*. 111. pp. 382–386. DOI: 10.1029/2005JC003183.
15. Gumerov N.A. (1992) Avtomodel'nyy rost sloya gazovogo gidrata, razdelyayushchego gaz i zhidkost' [Self-similar growth of a gas hydrate layer separating gas and liquid]. *Izv. RAN. Mekhanika zhidkosti i gaza – Fluid Dynamics.* 5. pp.78–85.
16. Shagapov V.Sh., Chiglintseva A.S., Kunsbaeva G.A. (2015) Teoreticheskie osnovy protsessa nagnetaniya gaza i kapel' vody v trubchatyy reaktor v usloviyakh gidratoobrazovaniya

[Theoretical bases of the process of gas and water drop injection into the tubular reactor under hydrate formation conditions]. *Vestnik Kazanskogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta im. A.N. Tupoleva*. 5(81). pp. 36–44.
17. Shagapov V.Sh., Chiglintseva A.S., Rusinov A.A. (2015) O mekhanizmakh rosta gidratnoy obolochki na poverkhnosti vsplyvayushchikh gazovykh puzyr'kov [On mechanisms of the hydrate shell growth on the surface of supernatant gas bubbles]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 3(35). pp. 73–86. DOI: 10.17223/19988621/35/10.
18. Shagapov V.Sh., Rafikova G.R., Khasanov M.K. (2016) On the theory of formation of gas hydrate in partially water-saturated porous medium when injecting methane. *High Temperature.* 54(6). pp. 858–866. DOI: 10.1134/S0018151X16060171.
19. Shagapov V.Sh., Khasanov M.K, Rafikova G.R. (2016) Vytesnenie metana iz gazogidratnogo plasta pri zakachke dioksida ugleroda [Displacement of methane from a gas hydrate reservoir in the process of carbon dioxide injection]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mehanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics.* 6(44). pp. 104–106. DOI: 10.17223/19988621/44/9.
20. Rudobashta S.P., Kartashov E.M. (2009) *Diffuziya v khimiko-tekhnologicheskikh protsessakh* [Diffusion in chemical and technological processes]. Moscow: KolosS.
21. Namiot A.Yu. (1981) *Rastvorimost' gazov v vode* [Solubility of the gases in water]. Moscow: Nedra.
22. Nigmatullin R.I. (1990) *Dynamics of multiphase media.* New York: Hemisphere.
23. Kuznetsov G.V., Sheremet M.A. (2007) *Raznostnye metody resheniya zadach teplopro-vodnosti* [Difference methods for solving heat conduction problems]. Tomsk: Izd. TPU.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БОРЗЕНКО Евгений Иванович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной газовой динамики и горения физико-технического факультета Томского государственного университета. E-mail: borzenko@ftf.tsu.ru

БУБЕНЧИКОВ Алексей Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической механики Томского государственного университета. E-mail: alexy121@mail.ru

БУБЕНЧИКОВ Михаил Алексеевич – кандидат физико-математических наук, ведущий специалист отдела инновационного развития и интеллектуальной собственности производственно-технического управления ООО «Газпром Трансгаз Томск». E-mail: michael121@mail.ru

БУХТЯК Михаил Степанович – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры геометрии механико-математического факультета Томского государственного университета. E-mail:bukhtyakm@mail.ru

ДЕМИН Виталий Анатольевич – доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой теоретической физики Пермского государственного национального исследовательского университета. E-mail: demin@psu.ru

ЕРЕМИНА Галина Максимовна – кандидат физико-математических наук, младший научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения СО РАН. E-mail: anikeeva@ispms.ru

КАСЫМОВА Рена Саттар кызы – ассистент кафедры оптимизации и управление Бакинского государственного университета, г. Баку, Азербайджанская Республика. E-mail: rena.kasimova@list.ru

КОЛЫХАЛОВА Ольга Эдуардовна – аспирантка механико-математического факультета Томского государственного университета. E-mail: ms.friol@mail.ru

КРАЙНОВ Алексей Юрьевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры математической физики физико-технического факультета Томского государственного университета. E-mail: akrainov@ftf.tsu.ru

МАТЫЕВА Зарина Олеговна – студентка физико-технического факультета Томского государственного университета. E-mail: amerz@mail.ru

МЕРЗЛЯКОВ Александр Владимирович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной аэромеханики физико-технического факультета Томского государственного университета. E-mail: amerz@mail.ru

МОИСЕЕВ Дмитрий Михайлович – аспирант физико-технического факультета Томского государственного университета. E-mail: dmm@sibmail.com

МОИСЕЕВА Ксения Михайловна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математической физики физико-технического факультета Томского государственного университета. E-mail: Moiseeva_KM@t-sk.ru

ПЕТУХОВ Максим Иванович: аспирант кафедры теоретической физики Пермского государственного национального исследовательского университета. E-mail: geniusmaxp@yandex.ru

РАФИКОВА Гузаль Ринатовна – кандидат физико-математических наук, ученый секретарь Института механики им. Р.Р. Мавлютова УНЦ РАНE-mail: rafikova_guzal@mail.ru

РЫЛЬЦЕВА Кира Евгеньевна – аспирантка физико-технического факультета Томского государственного университета. E-mail: kiraworkst@gmail.com

СМОЛИН Алексей Юрьевич – доктор математических наук, профессор, профессор кафедры механики деформируемого твёрдого тела Томского государственного университета, главный научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения СО РАН. E-mail: asmolin@ispms.ru

ТАГИЕВ Рафиг Каландар оглы – доктор математических наук, профессор, заведующий кафедрой оптимизации и управления Бакинского государственного университета, г. Баку, Азербайджанская Республика. E-mail: r.tagiyev@list.ru
ТАРАСОВ Егор Александрович – ассистент кафедры теоретической механики механико-математического факультета Томского государственного университета. E-mail: DiomedIS@mail.ru
ФРОЛОВ Олег Юрьевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной газовой динамики и горения физико-технического факультета Томского государственного университета. E-mail: frolov@ftf.tsu.ru.
ЧИГЛИНЦЕВА Ангелина Сергеевна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры высшей и прикладной математики, Бирский филиал ФГБОУ ВО «Башкирский государственный университет». E-mail: changelina@rambler.ru
ШАГАПОВ Владислав Шайхулагзамович – академик Академии наук РБ, профессор, доктор физико-математических наук, профессор каф. высшей и прикладной математики, Бирский филиал ФГБОУ «Башкирский государственный университет» (г. Бирск), главный научный сотрудник ФГБУН Института механики и машиностроения Казанского научного центра РАН. E-mail: shagapov@rambler.ru
ШРАГЕР Геннадий Рафаилович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной газовой динамики и горения физико-технического факультета Томского государственного университета. E-mail: shg@ftf.tsu.ru
ЩЕРБАКОВ Николай Романович – доктор физико-математических наук, доцент, заведующий кафедрой геометрии Томского государственного университета. E-mail: nrs@math.tsu.ru
ЩЁГОЛЕВА Анастасия Андреевна – аспирантка механико-математического факультета Томского государственного университета. E-mail: nschegoleva@sibmail.com

Оригинал-макет подготовлен
ООО «Издательство научно-технической литературы»
634050, Томск, пл. Новособорная, 1, тел. (3822) 533-335

Редактор *Т.С. Портнова*
Верстка *Д.В. Фортеса*

Изд. лиц. ИД № 04000 от 12.02.2001.
Подписано к печати 17.08.2017. Выпуск в свет 07.09.2017.
Формат 70 × 100 $^{1}/_{16}$. Бумага офсетная. Печать цифровая. Гарнитура «Таймс».
Усл. п. л. 8.06. Уч.-изд. л. 9.03. Тираж 250 экз. Заказ № 27. Цена свободная.

Отпечатано на оборудовании
Издательского Дома Томского государственного университета,
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, тел. (3822) 531-528, 529-849. Заказ № 2705.
http://publish.tsu.ru E-mail: rio.tsu@mail.ru