

**ВЕСТНИК
ТОМСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА**

МАТЕМАТИКА И МЕХАНИКА

TOMSK STATE UNIVERSITY
JOURNAL OF MATHEMATICS AND MECHANICS

Научный журнал

2019

№ 58

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»

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ ЖУРНАЛА «ВЕСТНИК ТОМСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА. МАТЕМАТИКА И МЕХАНИКА»

А.М. Липанов, д-р техн. наук, проф., академик РАН; С.М. Пергаменщиков, д-р физ.-мат. наук, проф.; О.В. Сипачёва, д-р физ.-мат. наук, проф.; А.А. Туганбаев, д-р физ.-мат. наук, проф.; С. Троянский, академик Болгарской академии наук, проф.; Д. Виегас, проф.; А. Симеони, проф.

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ ЖУРНАЛА

А.А. Глазунов (главный редактор), С.П. Гулько (зам. главного редактора), Е.Г. Лазарева (отв. секретарь по разделу «Математика»), К.М. Моисеева (отв. секретарь по разделу «Механика»), В.Н. Берцун, В.И. Биматов, А.М. Бубенчиков, И.М. Васенин, А.Ю. Веснин, А.М. Гришин, А.Н. Ищенко, В.В. Конеv, А.Ю. Крайнов, П.А. Крылов, С.В. Панько, В.А. Скрипняк, А.В. Старченко, Г.Р. Шрагер, Э.Р. Шрагер.

EDITORIAL COUNCIL

Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics

Alexey M. Lipanov, Doctor of Technics, Professor, Academician Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia; Sergey M. Pergamenschikov, Professor, Rouen, France; Olga V. Sipacheva, Doctor of Physics and Mathematics, Moscow, Russia; Askar A. Tuganbaev, Doctor of Physics and Mathematics, Moscow, Russia; Stanimir Troyanski, Academician Bulgarian Academy of Sciences, Professor, Murcia, Spain; Domingos X. Viegas, Professor, Coimbra, Portugal; Albert Simeoni, Professor, Edinburgh, Great Britain.

EDITORIAL BOARD

Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics

Anatoliy A. Glazunov (Head of the Editorial Board), Sergey P. Gulko (Deputy Head of the Editorial Board), Elena G. Lazareva (Executive Editor of the Mathematics Section), Kseniya M. Moiseeva (Executive Editor of the Mechanics Section), Vladimir N. Bertsun, Vladimir I. Bimатов, Aleksey M. Bubenichikov, Igor M. Vasenin, Andrei Yu. Vesnin, Anatoliy M. Grishin, Aleksandr N. Ishchenko, Viktor V. Konev, Aleksey Yu. Krainov, Pyotr A. Krylov, Sergey V. Panko, Vladimir A. Skripnyak, Aleksandr V. Starchenko, Gennadiy R. Shrager, Ernst R. Shrager.

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.

Внесён в Ulrich's Periodicals Directory. Индексируется: eLIBRARY.ru; Math-Net.ru; Scopus.com; ESCI (Web of Science). Реферируется в MatSciNet.

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

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

Гладков С.О., Богданова С.Б. О классе двумерных геодезических кривых в поле силы тяжести.....	5
Pchelintsev E.A., Pergamenshchikov S.M. Improved model selection method for an adaptive estimation in semimartingale regression models	14
Рудницкий О.И. Каноническая система базисных инвариантов унитарной группы $W(K_5)$	32
Смоленцев Н.К. Левоинвариантные почти пара-эрмитовы структуры на некоторых шестимерных нильпотентных группах Ли	41

МЕХАНИКА

Борзенко Е.И., Рыльцева К.Е., Шрагер Г.Р. Численное исследование характеристик течения неньютоновской жидкости в трубе с внезапным сужением	56
Дьякова О.А., Фролов О.Ю. Исследование структуры неизотермического потока степенной жидкости в L-образном канале.....	71
Зятиков П.Н., Синябрюхов К.В., Березовский Ю.С., Трушко А.С. Влияние направления трещин многостадийного гидравлического разрыва пласта на коэффициент извлечения нефти.....	84
Микушина В.А., Смолин И.Ю. Численное моделирование деформирования и разрушения пористой алюмооксидной керамики на мезоуровне.....	99
Москвичев Е.Н., Скрипняк В.А., Каракулов В.В., Лычагин Д.В. Влияние микроструктурных изменений при циклическом рифлении прессованием на механическое поведение магниевого сплава Mg–Mn–Se	109
Порязов В.А., Крайнов Д.А. Математическое моделирование эрозионного горения металлизированных твердых топлив.....	119
Скалнух А.С. Функциональная зависимость физических характеристик от необратимых параметров при электромеханическом воздействии на сегнетоэлектрические керамики	128
СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ	142

CONTENTS

MATHEMATICS

Gladkov S.O., Bogdanova S.B. On the class of two-dimensional geodesic curves in the field of the gravity force	5
Pchelintsev E.A., Pergamenshchikov S.M. Improved model selection method for an adaptive estimation in semimartingale regression models	14
Rudnitskii O.I. Canonical system of basic invariants for unitary group $W(K_5)$	32
Smolentsev N.K. Left-invariant almost para-Hermitian structures on some six-dimensional nilpotent Lie groups	41

MECHANICS

Borzenko E.I., Ryltseva K.E., Shrager G.R. Numerical investigation of non-Newtonian fluid flow through a pipe sudden contraction.....	56
Dyakova O.A., Frolov O.Yu. Investigation of the structure of non-isothermal power-law fluid flow in an L-shaped channel.....	71
Zyatikov P.N., Sinebryukhov K.V., Berezovsky Yu.S., Trushko A.S. Impact of the crack direction in a multistage hydraulic fracturing on the oil recovery factor.	84
Mikushina V.A., Smolin I.Yu. Numerical modeling of the deformation and fracture of a porous alumina ceramics at mesoscale.....	99
Moskvichev E.N., Skripnyak V.A., Karakulov V.V., Lychagin D.V. Impact of the microstructure changes under cyclic groove pressing on the mechanical behavior of Mg–Mn–Ce magnesium alloy	109
Poryazov V.A., Krainov D.A. Mathematical modeling of the erosive burning of metallized solid propellants.....	119
Skaliukh A.S. Functional dependence of the physical characteristics on irreversible parameters under electromechanical action on the ferroelectric ceramics.....	128
BRIEF INFORMATION ABOUT THE AUTHORS	142

МАТЕМАТИКА

УДК 531.011
DOI 10.17223/19988621/58/1

MSC 53Z05

С.О. Гладков, С.Б. Богданова

О КЛАССЕ ДВУХМЕРНЫХ ГЕОДЕЗИЧЕСКИХ КРИВЫХ
В ПОЛЕ СИЛЫ ТЯЖЕСТИ

Получена система нелинейных дифференциальных уравнений, описывающая семейство геодезических линий в двухмерном случае, характеризуемых полярными координатами, при учете действия как силы тяжести, так и диссипативных сил. Найдено численное решение этой системы уравнений в условиях, когда действует одна только сила тяжести. Показано существенное отличие найденного семейства линий, описывающих кратчайшие расстояния в неевклидовом пространстве, от случая свободного движения тел в поле силы тяжести, когда траектория движения представляет собой обычную параболу в евклидовом.

Ключевые слова: геодезическая, тензор Римана, динамические уравнения.

При решении большого класса физических задач из областей механики, гидродинамики, теории упругости, общей теории относительности и др., всегда выбираются такие ковариантные преобразования координат, которые позволяют самым рациональным способом находить решение поставленных проблем. В этой связи, имеющей прямое отношение непосредственно к нашей задаче, надо отметить, что при изучении динамики любого криволинейного движения в декартовой системе координат всегда удобно перейти к подвижному базису на самой траектории движения (см. работы [1–3]). Этот подход позволяет решать определенный класс динамических задач весьма рациональным методом, позволяющим учитывать любые силы сопротивления (см. рис. 1, изображенный в декартовых координатах $x-y$, где показана криволинейная траектория движения, представляющая собой в общем случае некоторую изогнутую линию, форма которой находится в рамках уже конкретно поставленной задачи).

Надо сказать, что при написании динамических уравнений движения тела в полярных координатах $r(\varphi)$ в рамках задачи, проиллюстрированной на рис. 1, ее решение качественно ничем не будет отличаться от решений, приведенных в упомянутых выше работах. Этот факт заставил нас предположить, что в случае перехода от динамических уравнений движения, записанных для плоского декартова пространства, в котором свертка тензора кривизны Римана R равна нулю, в кривое пространство, в котором $R \neq 0$, динамические уравнения движения качественно довольно сильно изменятся (см. ниже). Именно поэтому, на наш взгляд, большой интерес будет представлять собой вывод динамических уравнений,

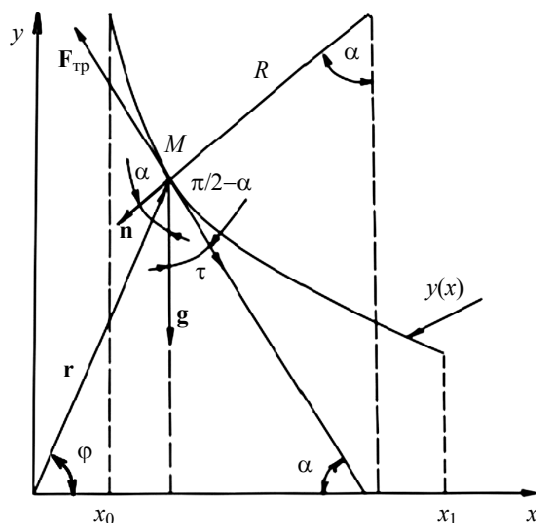


Рис. 1. Схематическое изображение геометрии задачи: $\mathbf{r} = ix + jy$ — радиус-вектор, проведенный из начала координат в произвольную точку наблюдения M ; $\mathbf{i}, \mathbf{j}$ — единичные орты в направлении осей x, y соответственно; $\mathbf{n}, \boldsymbol{\tau}$ — мгновенный ортогональный базис в текущей точке M ; $\mathbf{g}$ — ускорение силы тяжести; R — радиус кривизны траектории в точке M . Условно x_0, x_1 — начало и конец траектории, φ — полярный угол.

Fig. 1. Schematic of the problem geometry. $\mathbf{r} = ix + jy$ is the radius vector drawn from the coordinate origin to an arbitrary observation point M ; $\mathbf{i}$ and $\mathbf{j}$ are the unitary vectors in the directions of the x and y axes, respectively; $\mathbf{n}, \boldsymbol{\tau}$ are the instantaneous orthogonal basis at the current point M ; and $\mathbf{g}$ is the acceleration of gravity. R is the radius of the trajectory curvature at the point M . Conventionally, x_0 and x_1 are the beginning and the end of the trajectory and φ is the polar angle.

полученных в римановом двухмерном пространстве для случая движения тела с массой m по геодезической линии, при учете сил сопротивления и силы тяжести. В процессе ее решения мы будем использовать весьма удобные в этом случае полярные координаты r, φ .

1. Уравнения динамики при движении тела по геодезической линии в двухмерном случае

Геодезическая линия для контравариантного вектора $\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}$ с компонентами

$v^i = \frac{dx^i}{dt}$ согласно, например, [4, 5] подчиняется уравнению

$$\frac{d^2 x^i}{ds^2} + \Gamma_{kl}^i \frac{dx^k}{ds} \frac{dx^l}{ds} = 0, \quad (1)$$

где ds – элемент длины траектории, а по повторяющимся индексам здесь и далее подразумевается суммирование. Γ_{kl}^i – символ Кристоффеля второго рода [4].

Его связь с символом Кристоффеля первого рода Γ_{ikl} определяется простым линейным соотношением $\Gamma_{kl}^i = g^{is} \Gamma_{skl}$, где g^{ik} – контравариантный метрический тензор. Он определяется соотношением

$$g^{ik} = \frac{\partial x^i}{\partial x_n} \frac{\partial x^k}{\partial x_n},$$

а символ Кристоффеля первого рода определяется как

$$\Gamma_{ikl} = \frac{\partial x_n}{\partial x^i} \frac{\partial^2 x_n}{\partial x^k \partial x^l}, \quad (2)$$

где ковариантные координаты x_i задаются преобразованиями $x_n = x_n(x^k)$.

В рассматриваемом нами случае полярной системы координат они имеют простой вид

$$x_1 = r \cos \varphi, \quad x_2 = r \sin \varphi \quad (3)$$

с элементом длины

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\varphi^2. \quad (4)$$

Разделив (4) на квадрат элемента времени dt^2 , находим

$$v^2 = v^r^2 + v^\varphi^2, \quad (5)$$

где контравариантные компоненты скорости есть

$$v^r = \dot{r}, \quad v^\varphi = r\dot{\varphi}, \quad (6)$$

а точка традиционно означает дифференцирование по времени. С учетом поля силы тяжести уравнения геодезической линии несколько видоизменяются, и согласно уравнению (1), мы имеем в этом случае следующие уравнения для вектора

скорости $v^i = \frac{dx^i}{dt}$:

$$\frac{dv^i}{dt} + \Gamma_{kl}^i v^k v^l = g^i + \frac{F^i}{m}, \quad (7)$$

где g^i – составляющие ускорения свободного падения в двумерном пространстве r, φ , а F^i – составляющие некоторой силы (см. ниже). При получении (7) в уравнении (1) было учтено линейное соотношение $ds = v dt$. Если с учетом сказанного записать уравнения (7) по компонентам, то легко получить следующую систему:

$$\begin{cases} \dot{v}^r + \Gamma_{kl}^r v^k v^l = g^r + \frac{F^r}{m}, \\ \dot{v}^\varphi + \Gamma_{kl}^\varphi v^k v^l = g^\varphi + \frac{F^\varphi}{m}. \end{cases} \quad (8)$$

Нетрудно показать, что отличные от нуля компоненты символа Кристоффеля будут только следующие:

$$\Gamma_{\varphi\varphi}^r = \Gamma_{r\varphi\varphi} = -\frac{1}{r}, \quad \Gamma_{r\varphi}^\varphi = \Gamma_{\varphi r}^\varphi = \Gamma_{\varphi r\varphi} = \Gamma_{\varphi\varphi r} = \frac{1}{r}. \quad (9)$$

С учетом (9) и (6), а также равенства $v_i = v^i$ из (8) получается искомая система уравнений

$$\begin{cases} \ddot{r} - r\dot{\varphi}^2 = g \sin \varphi - \frac{F_{\text{fr}}}{m} \sin \gamma, \\ \frac{d}{dt}(r\dot{\varphi}) + 2\dot{r}\dot{\varphi} = -g \cos \varphi - \frac{F_{\text{fr}}}{m} \cos \gamma, \end{cases} \quad (10)$$

где F_{fr} представляет собой силу общего сопротивления (сухого и вязкого, как это сделано, например, в работах [1, 3]) при условии, что движение происходит по геодезической, а угол $\gamma = \alpha - \varphi$ (см. рис. 1).

Раскрывая в (10) производную, находим с учетом сказанного

$$\begin{cases} \ddot{r} - r\dot{\varphi}^2 = g \sin \varphi + \frac{F_{\text{fr}}}{m} \cos(\alpha - \varphi), \\ r\ddot{\varphi} + 3\dot{r}\dot{\varphi} = -g \cos \varphi - \frac{F_{\text{fr}}}{m} \sin(\alpha - \varphi). \end{cases} \quad (11)$$

Что касается силы сопротивления F_{fr} , фигурирующей в уравнениях (10) и (11), введем ее также, как это сделано и в работе [3], то есть по формуле

$$F^i = k_1^{ik} N^k + k_2 v^i, \quad (12)$$

где k_1^{ik} – компоненты тензора сухого трения, k_2 – коэффициент вязкого трения, N^i – компоненты силы реакции, которые находятся как

$$N^i = mn^i \left(\frac{v^2}{\rho} + g \cos \alpha \right), \quad (13)$$

где ρ – мгновенный радиус кривизны траектории.

Заметим, что описание движения тела по реальной плоской линии, уравнение которой мы хотим найти из условия того, что ее длина в криволинейном пространстве является наименьшей, то есть геодезической, существенно отличается от задачи о брахистохроне, решенной в работе [1], где форма кривой ищется из иного условия, а именно из условия минимальности времени скатывания. Понятно, что для обеих задач класс траекторий движения будет абсолютно разным.

В настоящем сообщении мы не будем учитывать диссипативную составляющую, а остановимся на анализе более простой ситуации, когда сила сопротивления отсутствует, то есть $F^i = 0$.

2. Анализ уравнений и их решение

Уравнения (11) при этом существенно упростятся, и мы получим тогда

$$\begin{cases} \ddot{r} - r\dot{\varphi}^2 = g \sin \varphi, \\ r\ddot{\varphi} + 3\dot{r}\dot{\varphi} = -g \cos \varphi. \end{cases} \quad (14)$$

Еще раз подчеркнем, что решение уравнений (14) позволяет найти зависимость $r(\varphi)$, описывающую наиболее короткий путь, по которому должно перемещаться тело в условиях действия только силы тяжести, но при условии, что рассматриваемое нами пространство искривлено, потому что в противном случае все символы Кристоффеля были бы равны нулю. Под сказанным мы подразумеваем следующее. Как известно [4, 5], термин «плоское пространство» означает равенство нулю скалярной кривизны Римана, то есть $R = R_{kki}^i = 0$, где R_{knl}^i – тензор Римана, определяемый как

$$R_{knl}^i = \frac{\partial \Gamma_{kn}^i}{\partial x^l} - \frac{\partial \Gamma_{kl}^i}{\partial x^n} + \Gamma_{ns}^i \Gamma_{kl}^s - \Gamma_{ls}^i \Gamma_{kn}^s. \quad (15)$$

Поэтому свертка по индексам дает

$$R = R_{kki}^i = \frac{\partial \Gamma_{kk}^i}{\partial x^i} - \frac{\partial \Gamma_{ki}^i}{\partial x^k} + \Gamma_{ks}^i \Gamma_{ki}^s - \Gamma_{is}^i \Gamma_{kk}^s, \quad (16)$$

и согласно (9) получаем отсюда, что кривизна

$$R = \frac{\partial \Gamma_{\varphi\varphi}^r}{\partial r} - \frac{\partial \Gamma_{r\varphi}^r}{\partial r} + \Gamma_{\varphi\varphi}^r \Gamma_{\varphi r}^r - \Gamma_{\varphi r}^r \Gamma_{\varphi\varphi}^r = \frac{2}{r^2} \neq 0. \quad (17)$$

Далее. В том случае, когда решается задача о движении тела под действием силы тяжести, но в обычной полярной системе координат, то предварительно их удобно записать в декартовых координатах в виде $\ddot{x}_1 = \ddot{x} = 0$, $\ddot{x}_2 = \ddot{y} = -g$, а затем подставить сюда преобразования (3). В результате мы получаем два уравнения, которые после простых арифметических действий, связанных со сложением и вычитанием их с предварительным домножением на $\sin \varphi$ и $\cos \varphi$, будут иметь вид

$$\begin{cases} \ddot{r} - r\dot{\varphi}^2 = g \sin \varphi, \\ r\ddot{\varphi} + 2\dot{r}\dot{\varphi} = -g \cos \varphi. \end{cases} \quad (18)$$

Как видим, разница между нижними уравнениями систем (14) и (18) весьма велика (они отличаются множителями 2 и 3). Таким образом, в кривом пространстве при движении по геодезической в поле одной только силы тяжести форма траектории при свободном движении будет довольно сильно отличаться от обычной параболы в евклидовом пространстве.

В том случае, если сила тяжести отсутствует, то правая часть уравнений (14) должна быть положена равной нулю, и решение будет вполне естественным, а именно $\dot{r} = \dot{\varphi} = 0$, то есть, как и должно быть, тело стоит на месте в точке с координатами $M_0 = M(r_0, \varphi_0)$.

Для численного решения уравнений (14) удобно ввести безразмерные функции $U = \frac{r}{a}$, $V = \varphi$ (где a – некоторый линейный размер) и безразмерный аргумент

$$\tau = \omega_0 t, \text{ где частота } \omega_0 = \sqrt{\frac{g}{a}}.$$

В результате уравнения (14) преобразуются в такие:

$$\begin{cases} U'' - UV'^2 = \sin V, \\ UV'' + 3U'V' = -\cos V, \end{cases} \quad (19)$$

где «штрих» означает дифференцирование по безразмерному τ .

Для начальных условий, выбранных в виде

$$U(0) = 0, \quad V(0) = 0, \quad U'(0) = A, \quad V'(0) = B, \quad (20)$$

в результате численного интегрирования уравнений (19) получаются параметрические зависимости $U(\tau)$, $V(\tau)$, а также искомая траектория геодезической в поле силы тяжести, проиллюстрированные рис. 2 и 3.

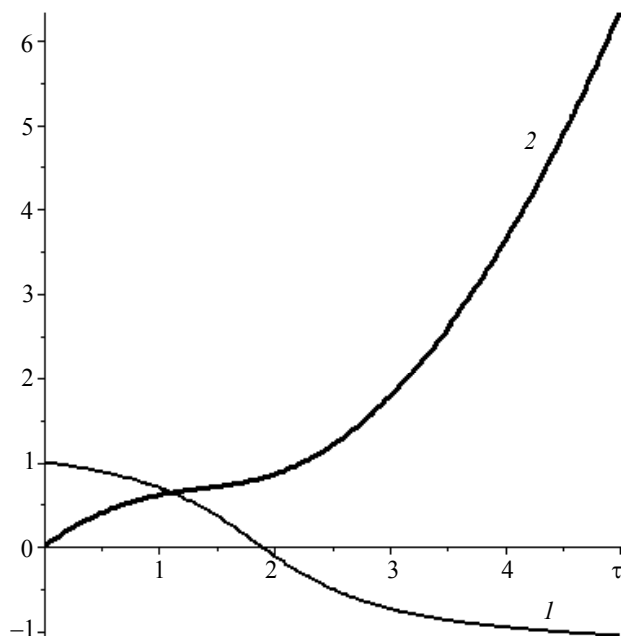


Рис. 2. Параметрические зависимости $x(\tau)$ – кр. 1, $y(\tau)$ – кр. 2 при начальных условиях $x(0) = 1, y(0) = 0, x'(0) = 0, y'(0) = 1$

Fig. 2. Parametric dependences (1) $x(\tau)$, (2) $y(\tau)$ at initial conditions $x(0) = 1, y(0) = 0, x'(0) = 0, y'(0) = 1$

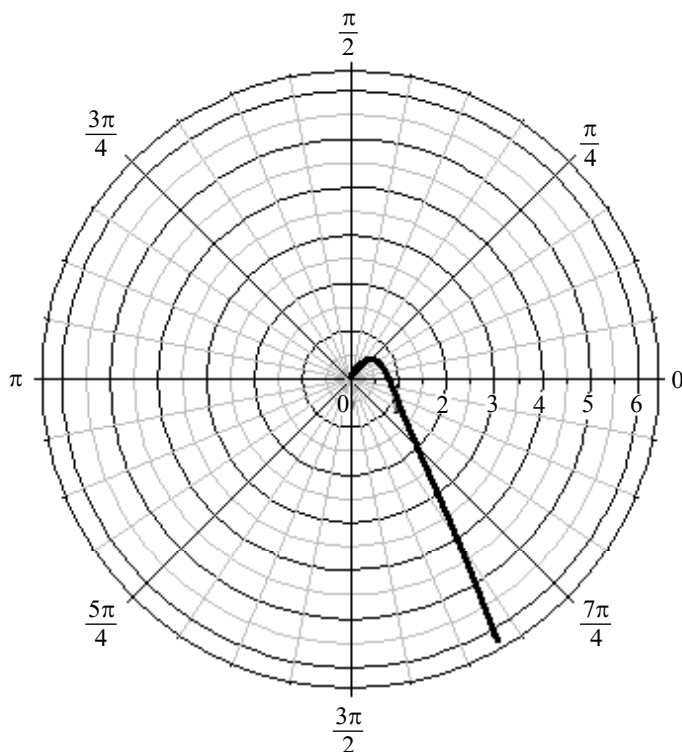


Рис. 3. Траектория геодезической в поле силы тяжести при начальных условиях $x(0) = 1, y(0) = 0, x'(0) = 0, y'(0) = 1$

Fig. 3. Trajectory of the geodesic line in the field of the force of gravity under the initial conditions $x(0) = 1, y(0) = 0, x'(0) = 0, y'(0) = 1$

Как видно из рис. 3, зависимость $y(x)$ довольно сильно отличается от обычной параболы, описывающей свободное движение тела в поле силы тяжести, брошенного под некоторым углом к горизонту.

Найденная зависимость $r(\varphi)$ ($U(V)$) представляет собой искомую кратчайшую траекторию в кривом пространстве в поле силы тяжести, уравнение которой можно получить только из решения дифференциального уравнения (1) или (14), но не из (18).

Заключение

Таким образом, в данной работе:

1. Описано движение материального тела, движущегося по геодезической линии в кривом двумерном пространстве под действием одной только силы тяжести, и показано, что ее форма существенно отличается от параболической;
2. Найдено численное решение полученной системы нелинейных дифференциальных уравнений и проиллюстрировано их решение в декартовых координатах (см. рис. 3). Как видно из этого графика, приведенная зависимость иллюстрирует ее сильное отклонение от параболической кривой, характерной для случая свободного падения тела в поле силы тяжести в евклидовом пространстве.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гладков С.О., Богданова С.Б. Геометрический фазовый переход в задаче о брахистохро-
не // УЗ ФФ МГУ. 2016. № 1. 161101-1-5.
2. Гладков С.О. О траектории движения тела, входящего в жидкость под произвольным уг-
лом // УЗ ФФ МГУ. 2016. № 4. 164101-1-5.
3. Гладков С.О., Богданова С.Б. Обобщенные динамические уравнения плоского криволи-
нейного движения материального тела по желобу с учетом сил трения (их численный
анализ в некоторых частных случаях) // УЗ ФФ МГУ. 2017. № 1. 171101-1-5.
4. Мак Коннел Дж. Введение в тензорный анализ с приложениями к геометрии, механике и
физике. М.: Физматлит, 1963. 411 с.
5. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. М.: Физматлит, 2003. 536 с.

Статья поступила 06.09.2018 г.

Gladkov S.O., Bogdanova S.B.(2019) ON THE CLASS OF TWO-DIMENSIONAL GEODESIC
CURVES IN THE FIELD OF THE GRAVITY FORCE *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo
universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and
Mechanics]. 58. pp. 5–13

DOI 10.17223/19988621/58/1

Keywords: geodesic, Riemann tensor, dynamical equations.

In this paper, without using methods of variational calculus, the problem of finding a geodesic in a curved space with respect to gravitational and dissipative forces was solved. Solving it, we use the most convenient polar coordinates r, φ . The basic assumption relies on the fact that dynamical motion equations written in curvilinear coordinates in which the Riemann curvature R is different from zero rather strongly differ from similar equations in the case of a flat space.

To obtain the required equation of a geodesic arc, a contravariant vector of the velocity $v^i = \frac{dx^i}{dt}$ was introduced. For this vector, with regard to all active forces, the following equation was solved:

$$\frac{dv^i}{dt} + \Gamma_{kl}^i v^k v^l = g^i + \frac{F^i}{m},$$

g^i are acceleration components of the gravitational force of the two-dimensional r - φ space, and the dissipative force is

$$F^i = k_1^{ik} N^k + k_2 v^i,$$

k_1^{ik} are tensor components of the dry friction, k_2 is the coefficient of the viscous friction, and N^i are the force components.

Provided that the scalar curvature of Riemann is different from zero,

$$R = \frac{\partial \Gamma_{\varphi\varphi}^r}{\partial r} - \frac{\partial \Gamma_{r\varphi}^\varphi}{\partial r} + \Gamma_{\varphi\varphi}^r \Gamma_{\varphi r}^\varphi - \Gamma_{\varphi r}^\varphi \Gamma_{\varphi\varphi}^r = \frac{2}{r^2} \neq 0,$$

a nonlinear system of differential equations governing the required geodesic was obtained in the polar coordinates r and φ :

$$\begin{cases} \ddot{r} - r\dot{\varphi}^2 = g \sin \varphi + \frac{F_{\text{fr}}}{m} \cos(\alpha - \varphi), \\ r\ddot{\varphi} + 3\dot{r}\dot{\varphi} = -g \cos \varphi - \frac{F_{\text{fr}}}{m} \sin(\alpha - \varphi), \end{cases}$$

where $r = |\mathbf{r}| = |\mathbf{i}x + \mathbf{j}y|$ is the length of the radius-vector drawn from the origin of coordinates to the observation point M lying on the geodesic line $y = y(x)$, φ is the polar angle of the reference point, and α is the acute angle between the tangent drawn to the point of M and to axis of abscissas.

The analytical and numerical solutions of this system in the absence of the resistance forces, i.e. $F_{fr} = 0$, showed the great difference between the found geodesic and the parabola typical for the case of free fall of bodies in the gravitational field in Euclidean space.

AMS Mathematical Subject Classification: 53Z05

GLADKOV Sergei Oktyabrinovich (Doctor of Physics and Mathematics, Moscow Aviation Institute, Department of Applied software and mathematical methods, Moscow, Russian Federation). E-mail: sglad51@mail.ru

BOGDANOVA Sofiya Borisovna (Candidate of Physics and Mathematics, Moscow Aviation Institute, Department of Applied software and mathematical methods, Moscow, Russian Federation). E-mail: sonjaf@list.ru

REFERENCES

1. Gladkov S.O., Bogdanova S.B. (2016) Geometric phase transition in the problem of brachistochrone. *Memoirs of the Faculty of Physics, Moscow State University*. 1. pp. 161101-1-5.
2. Gladkov S.O. (2016) On the trajectory of a moving body coming into liquid at an arbitrary angle. *Memoirs of the Faculty of Physics, Moscow State University*. 4. pp. 164101-1-5.
3. Gladkov S.O., Bogdanova S.B. (2017) Generalized dynamic equations of the plane curvilinear motion of a material body on a trench with account of friction forces (their numerical analysis in some special cases). *Memoirs of the Faculty of Physics, Moscow State University*. 1. pp. 171101-1-5.
4. McConnell J. (1957) *Application of tensor analysis*. New York: Dover Publications, INC.
5. Landau L., Lifshitz E. (2003) *Field theory*. Moscow: Fizmatlit.

Received: September 6, 2018

UDC 519.2
DOI 10.17223/19988621/58/2

MSC 62G08; 62G05

E.A. Pchelintsev, S.M. Pergamenshchikov

IMPROVED MODEL SELECTION METHOD FOR AN ADAPTIVE ESTIMATION IN SEMIMARTINGALE REGRESSION MODELS¹

This paper considers the problem of robust adaptive efficient estimating of a periodic function in a continuous time regression model with the dependent noises given by a general square integrable semimartingale with a conditionally Gaussian distribution. An example of such noise is the non-Gaussian Ornstein–Uhlenbeck–Lévy processes. An adaptive model selection procedure, based on the improved weighted least square estimates, is proposed. Under some conditions on the noise distribution, sharp oracle inequality for the robust risk has been proved and the robust efficiency of the model selection procedure has been established. The numerical analysis results are given.

Key words: improved non-asymptotic estimation, least squares estimates, robust quadratic risk, non-parametric regression, semimartingale noise, Ornstein–Uhlenbeck–Lévy process, model selection, sharp oracle inequality, asymptotic efficiency.

1. Introduction

Consider a regression model in continuous time

$$dy_t = S(t)dt + d\xi_t, \quad 0 \leq t \leq n, \quad (1.1)$$

where S is an unknown 1-periodic $\mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ function, $S \in \mathbf{L}_2[0,1]$, $(\xi_t)_{0 \leq t \leq n}$ is an unobservable noise which is a square integrated semimartingale with the values in the Skorokhod space $\mathbf{D}[0,n]$ such that, for any function f from $\mathbf{L}_2[0,1]$, the stochastic integral

$$I_n(f) = \int_0^n f(s) d\xi_s \quad (1.2)$$

has the following properties

$$\mathbf{E}_Q I_n(f) = 0 \quad \text{and} \quad \mathbf{E}_Q I_n^2(f) \leq \kappa_Q \int_0^n f^2(s) ds. \quad (1.3)$$

Here $\mathbf{E}_Q$ denotes the expectation with respect to the distribution Q of the noise process $(\xi_t)_{0 \leq t \leq n}$ on the space $\mathbf{D}[0,n]$, $\kappa_Q > 0$ is some positive constant depending on the distribution Q . The noise distribution Q is unknown and assumed to belong to some probability family $\mathcal{Q}_n$ specified below. Note that the semimartingale regression models in continuous time were introduced by Konev and Pergamenshchikov in [8, 9] for the signal estimation problems. It should be noted also that the class of the noise processes

¹ This work is supported by RSF, Grant no 17-11-01049.

$(\xi_t)_{t \geq 0}$ satisfying conditions (1.3) is rather wide and comprises, in particular, the Lévy processes which are used in different applied problems (see [2], for details). Moreover, as is shown in Section 2, non-Gaussian Ornstein–Uhlenbeck-based models enter this class.

The problem is to estimate the unknown function S in the model (1.1) on the basis of observations $(y_t)_{0 \leq t \leq n}$. In this paper we use the quadratic risk, i.e. for any estimate $\hat{S}$ we set

$$\mathcal{R}_Q(\hat{S}_n, S) := \mathbf{E}_{Q,S} \|\hat{S}_n - S\|^2 \quad \text{and} \quad \|S\|^2 = \int_0^1 S^2(t) dt, \quad (1.4)$$

where $\mathbf{E}_{Q,S}$ stands the expectation with respect to the distribution $\mathbf{P}_{Q,S}$ of the process in (1.1) with a fixed distribution Q of the noise $(\xi_t)_{0 \leq t \leq n}$ and a given function S . Moreover, in the case when the distribution Q is unknown we use also the robust risk

$$\mathcal{R}^*(\hat{S}_n, S) = \sup_{Q \in \mathcal{Q}_n} \mathcal{R}_Q(\hat{S}_n, S). \quad (1.5)$$

The goal of this paper is to develop the adaptive robust efficient model selection method for the regression (1.1) with dependent noises having conditionally Gaussian distribution using the improved estimation approach. This paper proposes the shrinkage least squares estimates which enable us to improve the non-asymptotic estimation accuracy. For the first time such idea was proposed by Fourdrinier and Pergamenschikov in [4] for regression models in discrete time and by Konev and Pergamenschikov in [10] for Gaussian regression models in continuous time. We develop these methods for the general semimartingale regression models in continuous time. It should be noted that for the conditionally Gaussian regression models we cannot use the well-known improved estimators proposed in [7] for Gaussian or spherically symmetric observations. To apply the improved estimation methods to the non-Gaussian regression models in continuous time one needs to use the modifications of the well-known James – Stein estimators proposed in [13, 14] for parametric estimation problems and developed in [16, 18]. We develop the new analytical tools which allow one to obtain the sharp non-asymptotic oracle inequalities for robust risks under general conditions on the distribution of the noise in the model (1.1). This method enables us to treat both the cases of dependent and independent observations from the same standpoint, it does not assume the knowledge of the noise distribution and leads to the efficient estimation procedure with respect to the risk (1.5). The validity of the conditions, imposed on the noise in the equation (1.1) is verified for a non-Gaussian Ornstein–Uhlenbeck process.

The rest of the paper is organized as follows. In the next Section 2, we describe the Ornstein–Uhlenbeck process as the example of a semimartingale noise in the model (1.1). In Section 3 we construct the shrinkage weighted least squares estimates and study the improvement effect. In Section 4 we construct the model selection procedure on the basis of improved weighted least squares estimates and state the main results in the form of oracle inequalities for the quadratic risk (1.4) and the robust risk (1.5). In Section 5 it is shown that the proposed model selection procedure for estimating S in (1.1) is asymptotically efficient with respect to the robust risk (1.5). In Section 6 we illustrate the performance of the proposed model selection procedure through numerical simulations. Section 7 gives the proofs of the main results.

2. Ornstein–Uhlenbeck–Lévy process

Now we consider the noise process $(\xi_t)_{t \geq 0}$ in (1.1) defined by a non-Gaussian Ornstein–Uhlenbeck process with the Lévy subordinator. Such processes are used in the financial Black–Scholes type markets with jumps (see, for example, [1], and the references therein). Let the noise process in (1.1) obey the equations

$$d\xi_t = a\xi_t dt + du_t, \quad \xi_0 = 0, \quad (2.1)$$

$$u_t = \varrho_1 w_t + \varrho_2 z_t \quad \text{and} \quad z_t = x * (\mu - \tilde{\mu})_t, \quad (2.2)$$

where $(w_t)_{t \geq 0}$ is a standard Brownian motion, $\mu(ds dx)$ is a jump measure with deterministic compensator $\tilde{\mu}(ds dx) = ds \Pi(dx)$, $\Pi(\cdot)$ is a Lévy measure, i.e. some positive measure on $\mathbb{R}_* = \mathbb{R} \setminus \{0\}$ (see, for example, in [3]), such that

$$\Pi(x^2) = 1 \quad \text{and} \quad \Pi(x^8) < \infty. \quad (2.3)$$

We use the notation $\Pi(|x|^m) = \int_{\mathbb{R}_*} |y|^m \Pi(dy)$. Note that the Lévy measure $\Pi(\mathbb{R}_*)$ could be equal to $+\infty$. We use $*$ for the stochastic integrals with respect to random measures, i.e.

$$x * (\mu - \tilde{\mu})_t = \int_0^t \int_{\mathbb{R}_*} y(\mu - \tilde{\mu})(ds, dy).$$

Moreover, we assume that the nuisance parameters $a \leq 0$, ϱ_1 and ϱ_2 satisfy the conditions

$$-a_{\max} \leq a \leq 0, \quad 0 < \underline{\varrho} \leq \varrho_1^2 \quad \text{and} \quad \sigma_Q = \varrho_1^2 + \varrho_2^2 \leq \zeta^*, \quad (2.4)$$

where the bounds $a_{\max}$, $\underline{\varrho}$ and ζ^* are functions of n , i.e. $a_{\max} = a_{\max}(n)$, $\underline{\varrho} = \underline{\varrho}_n$ and $\zeta^* = \zeta_n^*$ such that for any $\delta > 0$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} n^{-\delta} a_{\max}(n) = 0, \quad \liminf_{n \rightarrow \infty} n^{\delta} \underline{\varrho}_n > 0 \quad \text{and} \quad \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-\delta} \zeta_n^* = 0. \quad (2.5)$$

We denote by Q_n the family of all distributions of process (1.1) – (2.1) on the Skorohod space $\mathbf{D}[0, n]$ satisfying the conditions (2.4) and (2.5). It should be noted that, in view of Corollary 7.2 in [17], the condition (1.3) for the process (2.1) holds with $\kappa_Q = 2\sigma_Q$.

Note also that the process (2.1) is conditionally Gaussian square integrable semimartingale with respect to σ -algebra $\mathcal{G} = \sigma\{z_t, t \geq 0\}$ which is generated by the jump process $(z_t)_{t \geq 0}$ defined in (2.2.).

3. Improved estimation

For estimating the unknown function S in (1.1) we will consider it's Fourier expansion. Let $(\phi_j)_{j \geq 1}$ be an orthonormal basis in $L_2[0, 1]$. We extend these functions periodically on $\mathbb{R}$, i.e. $\phi_j(t) = \phi_j(t+1)$ for any $t \in \mathbb{R}$.

B₁) Assume that the basis functions are uniformly bounded, i.e. for some constant $\phi^* \geq 1$, which may be depend on n ,

$$\sup_{1 \leq j \leq n} \sup_{0 \leq t \leq 1} |\phi_j(t)| \leq \phi^* < \infty. \quad (3.1)$$

B₂) Assume that there exist some $d_0 \geq 7$ and $\check{a} \geq 1$ such that

$$\sup_{d \geq d_0} \frac{1}{d} \int_0^1 \Phi_d^*(v) dv \leq \check{a}, \quad \Phi_d^*(v) = \max_{t \geq v} \left| \sum_{j=1}^d \phi_j(t) \phi_j(t-v) \right|. \quad (3.2)$$

For example, we can take the trigonometric basis defined as $\text{Tr}_1 \equiv 1$, $\text{Tr}_j(t) = \sqrt{2} \cos(\omega_j t)$ for even j and $\text{Tr}_j(t) = \sqrt{2} \sin(\omega_j t)$ for odd $j \geq 2$, where the frequency $\omega_j = 2\pi[j/2]$ and $[x]$ denotes integer part of x . As is shown in Lemma A1 in [17], these functions satisfy the condition **B₂)** with $d_0 = \inf\{d \geq 7 : 5 + \ln d \leq d\}$ and $\check{a} = (1 - e^{-a_{\max}})/(4a_{\max})$.

We write the Fourier expansion of the unknown function S in the form

$$S(t) = \sum_{j=1}^{\infty} \theta_j \phi_j(t),$$

where the corresponding Fourier coefficients

$$\theta_j = (S, \phi_j) = \int_0^1 S(t) \phi_j(t) dt \quad (3.3)$$

can be estimated as

$$\hat{\theta}_{j,n} = \frac{1}{n} \int_0^n \phi_j(t) dy_t. \quad (3.4)$$

We replace the differential $S(t)dt$ by the stochastic observed differential dy_t . In view of (1.1), one obtains

$$\hat{\theta}_{j,n} = \theta_j + \frac{1}{\sqrt{n}} \xi_{j,n}, \quad \xi_{j,n} = \frac{1}{\sqrt{n}} I_n(\phi_j) \quad (3.5)$$

and $I_n(\phi_j)$ is given in (1.2). As in [11], we define a class of weighted least squares estimates for $S(t)$ as

$$\hat{S}_\gamma = \sum_{j=1}^n \gamma(j) \hat{\theta}_{j,n} \phi_j \quad (3.6)$$

with the weights $\gamma = (\gamma(j))_{1 \leq j \leq n} \in \mathbb{R}^n$ which belong to some finite set Γ from $[0,1]^n$.

We put

$$v = \text{card}(\Gamma) \text{ and } \|\gamma\|_* = \max_{\gamma \in \Gamma} \sum_{j=1}^n \gamma(j), \quad (3.7)$$

where $\text{card}(\Gamma)$ is the number of the vectors γ in Γ . In the sequel we assume that all vectors from Γ satisfies the following condition.

D₁) Assume that for any vector $\gamma \in \Gamma$ there exists some fixed integer $d = d(\gamma)$ such that the first d components of the vector are equal to one, i.e. $\gamma(j) = 1$ for $1 \leq j \leq d$ for any $\gamma \in \Gamma$.

D₂) There exists $n_0 \geq 1$ such that for any $n \geq n_0$ there exists a σ -field $\mathcal{G}_n$ for which the random vector $\tilde{\xi}_{d,n} = (\xi_{j,n})_{1 \leq j \leq d}$ is the $\mathcal{G}_n$ -conditionally Gaussian in $\mathbb{R}^d$ with the covariance matrix

$$\mathbf{G}_n = (\mathbf{E}(\xi_{i,n}, \xi_{j,n} \mid \mathcal{G}_n))_{1 \leq i, j \leq d} \quad (3.8)$$

and for some nonrandom constant $l_n^* > 0$

$$\inf_{Q \in \mathcal{Q}_n} (tr \mathbf{G}_n - \lambda_{\max}(\mathbf{G}_n)) \geq l_n^* \text{ a.s.}, \quad (3.9)$$

where $\lambda_{\max}(A)$ is the maximal eigenvalue of the matrix A .

As is shown in Proposition 7.11 in [17], the condition **D₂**) holds for the non-Gaussian Ornstein–Uhlenbeck-based model (1.1) – (2.1) with $l_n^* = \underline{\varrho}_n(d-6)/2$ and $d \geq d_0$.

Further we will use the improved estimation method proposed for parametric models in [14] for the first d Fourier coefficients in (3.5). To this end we set $\tilde{\theta}_n = (\hat{\theta}_{j,n})_{1 \leq j \leq d}$.

In the sequel we will use the norm $|x|_d^2 = \sum_{j=1}^d x_j^2$ for any vector $x = (x_j)_{1 \leq j \leq d}$ from $\mathbb{R}^d$.

Now we define the shrinkage estimators as

$$\theta_{j,n}^* = (1 - g(j)) \hat{\theta}_{j,n}, \quad (3.10)$$

with $g(j) = (\mathbf{c}_n / |\tilde{\theta}_n|_d) \mathbf{1}_{\{1 \leq j \leq d\}}$; $\mathbf{1}_A$ is the indicator of the set A ,

$$\mathbf{c}_n = \frac{l_n^*}{(r_n^* + \sqrt{d \kappa_* / n}) n}, \quad \kappa_* = \sup_{Q \in \mathcal{Q}_n} \kappa_Q.$$

The positive parameter r_n^* is such that

$$\lim_{n \rightarrow \infty} r_n^* = \infty \text{ and } \lim_{n \rightarrow \infty} n^{-\delta} r_n^* = 0 \quad (3.11)$$

for any $\delta > 0$.

Now we introduce a new class of shrinkage weighted least squares estimates for S as

$$S_\gamma^* = \sum_{j=1}^n \gamma(j) \theta_{j,n}^* \phi_j. \quad (3.12)$$

Let $\Delta_Q(S) := \mathcal{R}_Q(S_\gamma^*, S) - \mathcal{R}_Q(\hat{S}_\gamma, S)$ denote the difference of quadratic risks of the estimates (3.12) and (3.6).

Theorem 3.1. Assume that the conditions **D₁**) – **D₂**) hold. Then for any $n \geq n_0$

$$\sup_{Q \in \mathcal{Q}_n} \sup_{\|S\| \leq r_n^*} \Delta_Q(S) < -\mathbf{c}_n^2. \quad (3.13)$$

Remark 3.1. The inequality (3.13) shows that for any $n \geq n_0$ the estimate (3.12) outperforms non-asymptotically the estimate (3.6) in mean square accuracy.

4. Model selection

This Section gives the construction of a model selection procedure for estimating a function S in (1.1) on the basis of improved weighted least square estimates and states the sharp oracle inequality for the robust risk of proposed procedure.

The model selection procedure for the unknown function S in (1.1) will be constructed on the basis of a family of estimates $(S_\gamma^*)_{\gamma \in \Gamma}$.

The performance of any estimate S_γ^* will be measured by the empirical squared error

$$\text{Err}_n(\lambda) = \|S_\lambda^* - S\|^2.$$

In order to obtain a good estimate, we have to formulate the rule for choosing a weight vector $\gamma \in \Gamma$ in (3.12). It is obvious, that the best way is to minimize the empirical squared error with respect to γ . Making use of the estimate definition (3.12) and the Fourier transformation of S imply

$$\text{Err}_n(\lambda) = \sum_{j=1}^n \gamma^2(j) (\theta_{j,n}^*)^2 - 2 \sum_{j=1}^n \gamma(j) \theta_{j,n}^* \theta_j + \sum_{j=1}^n \theta_j^2. \quad (4.1)$$

Since the Fourier coefficients $(\theta_j)_{j \geq 1}$ are unknown, the weight coefficients $(\gamma_j)_{j \geq 1}$ cannot be found by minimizing this quantity. To circumvent this difficulty one needs to replace the terms $\theta_{j,n}^* \theta_j$ by their estimators $\tilde{\theta}_{j,n}$. We set

$$\tilde{\theta}_{j,n} = \theta_{j,n}^* \hat{\theta}_{j,n} - \frac{\hat{\sigma}_n}{n}, \quad (4.2)$$

where $\hat{\sigma}_n$ is the estimate for the noise variance of $\sigma_Q = \mathbf{E}_Q \xi_{j,n}^2$ which we choose in the following form

$$\hat{\sigma}_n = \sum_{j=\lfloor \sqrt{n} \rfloor + 1}^n \hat{t}_{j,n}^2 \quad \text{and} \quad \hat{t}_{j,n} = \frac{1}{n} \int_0^n \phi_j(t) dy_t. \quad (4.3)$$

For this change in the empirical squared error, one has to pay some penalty. Thus, one comes to the cost function of the form

$$J_n(\gamma) = \sum_{j=1}^n \gamma^2(j) (\theta_{j,n}^*)^2 - 2 \sum_{j=1}^n \gamma(j) \tilde{\theta}_{j,n} + \rho \hat{P}_n(\gamma), \quad (4.4)$$

where ρ is some positive constant, $\hat{P}_n(\gamma)$ is the penalty term defined as

$$\hat{P}_n(\gamma) = \frac{\hat{\sigma}_n |\gamma|_n^2}{n}. \quad (4.5)$$

Substituting the weight coefficients, minimizing the cost function

$$\gamma^* = \text{agrmin}_{\gamma \in \Gamma} J_n(\gamma) \quad (4.6)$$

in (3.12) leads to the improved model selection procedure

$$S^* = S_{\lambda^*}^*. \quad (4.7)$$

It will be noted that γ^* exists because Γ is a finite set. If the minimizing sequence γ^* in (4.6) is not unique, one can take any minimizer.

To prove the sharp oracle inequality, the following conditions will be needed for the family Q_n of distributions of the noise $(\xi_t)_{t \geq 0}$ in (1.1). Namely, we need to impose some stability conditions for the noise Fourier transform sequence $(\xi_{j,n})_{1 \leq j \leq n}$ introduced in [15].

C₁) *There exists a proxy variance $\sigma_Q > 0$ such that for any $\varepsilon > 0$*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{L_{1,n}(Q)}{n^\varepsilon} = 0, \quad L_{1,n}(Q) = \sum_{j=1}^n \left| \mathbf{E}_Q \xi_{j,n}^2 - \sigma_Q \right|. \quad (4.8)$$

C₂) *Assume that for any $\varepsilon > 0$*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{L_{2,n}(Q)}{n^\varepsilon} = 0, \quad L_{2,n}(Q) = \sup_{|x| \leq 1} \mathbf{E}_Q \left(\sum_{j=1}^n x_j (\xi_{j,n}^2 - \mathbf{E}_Q \xi_{j,n}^2) \right)^2. \quad (4.9)$$

Theorem 4.1. *If the conditions **C₁**) and **C₂**) hold for the distribution Q of the process $(\xi_t)_{t \geq 0}$ in (1.1), then, for any $n \geq 1$ and $0 < \rho < 1/2$, the risk (1.4) of estimate (4.7) for S satisfies the oracle inequality*

$$\mathcal{R}_Q(S^*, S) \leq \frac{1+5\rho}{1-\rho} \min_{\gamma \in \Gamma} \mathcal{R}_Q(S_\gamma^*, S) + \frac{\mathbf{B}_n(Q)}{\rho n}, \quad (4.10)$$

where $\mathbf{B}_n(Q) = \mathbf{U}_n(Q) (1 + |\Gamma|_* \mathbf{E}_Q |\hat{\sigma}_n - \sigma_Q|)$ and the coefficient $\mathbf{U}_n(Q)$ is such that for any $\varepsilon > 0$

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{\mathbf{U}_n(Q)}{n^\varepsilon} = 0. \quad (4.11)$$

In the case, when the value of σ_Q in **C₁**) is known, one can take $\hat{\sigma}_n = \sigma_Q$. Then

$$P_n(\gamma) = \frac{\sigma_Q |\gamma|_n^2}{n}, \quad (4.12)$$

and we can rewrite the oracle inequality (4.10) with $\mathbf{B}_n(Q) = \mathbf{U}_n(Q)$. Now we study the estimate (4.3). To obtain the oracle inequality for the robust risk (1.5) we need some additional condition on the distribution family Q_n . We set

$$\zeta_n^* = \zeta_n^* = \sup_{Q \in Q_n} \sigma_Q. \quad (4.13)$$

C₁^{*}) *Assume that the limit equations (4.8) – (4.9) hold uniformly in $Q \in Q_n$ and $\zeta_n^* / n^\varepsilon \rightarrow 0$ as $n \rightarrow \infty$ for any $\varepsilon > 0$.*

Now we impose some conditions on the set of the weight coefficients Γ .

C₂^{*}) *Assume that the set Γ is such that $\forall / n^\varepsilon \rightarrow 0$ and $|\Gamma|_* / n^{1/2+\varepsilon} \rightarrow 0$ as $n \rightarrow \infty$ for any $\varepsilon > 0$.*

As is shown in [17], both conditions C_1^* and C_2^* hold for the model (1.1) with Ornstein–Uhlenbeck noise process (2.1). Using Proposition 4.2 from [17] we can obtain the following result.

Theorem 4.2. *Assume that the conditions C_1^* and C_2^* hold and the function $S(t)$ is continuously differentiable. Then the robust risk (1.5) of the estimate (4.7) satisfies the oracle inequality, for any $n \geq 2$ and $0 < \rho < 1/2$,*

$$\mathcal{R}_n^*(S^*, S) \leq \frac{1+5\rho}{1-\rho} \min_{\gamma \in \Gamma} \mathcal{R}_n^*(S_\gamma^*, S) + \frac{1}{\rho n} \mathbf{B}_n^* (1 + \|\dot{S}\|^2),$$

where the term $\mathbf{B}_n^*$ has the property (4.11).

Now we specify the weight coefficients $(\gamma(j))_{j \geq 1}$ as proposed in [5, 6] for a heteroscedastic regression model in discrete time. Firstly, we define the normalizing coefficient $v_n = n/\zeta^*$. Consider a numerical grid of the form

$$\mathcal{A}_n = \{1, \dots, k^*\} \times \{r_1, \dots, r_m\},$$

where $r_i = i\varepsilon$ and $m = \lceil 1/\varepsilon^2 \rceil$. We assume that the parameters $k^* \geq 1$ and $0 < \varepsilon \leq 1$ are functions of n , i.e. $k^* = k^*(n)$ and $\varepsilon = \varepsilon(n)$, such that $k^*(n) \rightarrow +\infty$, $\varepsilon(n) \rightarrow 0$, $k^*(n)/\ln n \rightarrow 0$ and $n^\delta \varepsilon(n) \rightarrow \infty$ as $n \rightarrow \infty$ for any $\delta > 0$. One can take, for example, $\varepsilon(n) = 1/\ln(n+1)$ and $k^*(n) = \sqrt{\ln(n+1)}$. For each $\alpha = (\beta, r) \in \mathcal{A}_n$, we introduce the weight sequence $\gamma_\alpha = (\gamma_\alpha(j))_{j \geq 1}$ as

$$\gamma_\alpha(j) = \mathbf{1}_{\{1 \leq j \leq d(\alpha)\}} + \left(1 - (j/\omega_\alpha)^\beta\right) \mathbf{1}_{\{d(\alpha) < j \leq \omega_\alpha\}},$$

where $\omega_\alpha = (\tau_\beta r v_n)^{1/(2\beta+1)}$, $\tau_\beta = (\beta+1)(2\beta+1)/(\pi^{2\beta}\beta)$ and $d(\alpha) = \lceil \omega_\alpha / \ln(n+1) \rceil$.

We set

$$\Gamma = \{\gamma_\alpha, \alpha \in \mathcal{A}_n\}. \quad (4.14)$$

It will be noted that such weight coefficients satisfy the condition $\mathbf{D}_1$.

5. Asymptotic efficiency

In order to study the asymptotic efficiency we define the following functional Sobolev ball

$$W_{k,\mathbf{r}} = \left\{ f \in C_p^k[0,1] : \sum_{i=0}^k \|f^{(i)}\|^2 \leq \mathbf{r} \right\}, \quad (5.1)$$

where $\mathbf{r} > 0$ and $k \geq 1$ are some unknown parameters, $C_p^k[0,1]$ is the space of k times differentiable 1-periodic functions such that $f^{(i)}(0) = f^{(i)}(1)$ for any $0 \leq i \leq k-1$. Let Σ_n denote all estimators $\hat{S}_n$, i.e. measurable functions with respect to $\sigma\{y_t, 0 \leq t \leq n\}$. In the sequel, we denote by $\mathcal{Q}^*$ the distribution of the process $(y_t)_{0 \leq t \leq n}$ with $\xi_t = \zeta^* w_t$, i.e. white noise model with the intensity ζ^* .

Theorem 5.1. Assume that $Q^* \in Q_n$. The robust risk (1.5) has the following lower bound

$$\liminf_{n \rightarrow \infty} \inf_{\hat{S}_n \in \Sigma_n} v_n^{2k/(2k+1)} \sup_{S \in W_{k,r}} \mathcal{R}_n^*(\hat{S}_n, S) \geq l_k(\mathbf{r}).$$

with $l_k(\mathbf{r}) = ((2k+1)\mathbf{r})^{1/(2k+1)} (k / (\pi(k+1)))^{2k/(2k+1)}$.

We show that this lower bound is sharp in the following sense.

Theorem 5.2. The model selection procedure (4.7), with the weight coefficients (4.14), satisfies the following upper bound

$$\limsup_{n \rightarrow \infty} v_n^{2k/(2k+1)} \sup_{S \in W_{k,r}} \mathcal{R}_n^*(S^*, S) \leq l_k(\mathbf{r}).$$

It is clear that these theorems imply the following efficiency property.

Corollary 5.3. Assume that $Q^* \in Q_n$. Then the model selection procedure (4.7), with the weight coefficients (4.14), is asymptotically efficient, i.e.

$$\lim_{n \rightarrow \infty} v_n^{2k/(2k+1)} \sup_{S \in W_{k,r}} \mathcal{R}_n^*(S^*, S) = l_k(\mathbf{r}).$$

Theorem 5.1 and Theorem 5.2 are proved in the same way as Theorems 1 and 2 in [9].

6. Monte Carlo simulations

In this section we give the results of numerical simulations to assess the performance and improvement of the proposed model selection procedure (4.7). We simulate the model (1.1) with 1-periodic function S of the form

$$S(t) = t \sin(2\pi t) + t^2(1-t) \cos(2\pi t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad (6.1)$$

and the Ornstein–Uhlenbeck noise process $(\xi_t)_{t \geq 0}$ defined by the equation

$$d\xi_t = -\xi_t dt + 0.5dw_t + 0.5dz_t, \quad z_t = \sum_{j=1}^{N_t} Y_j;$$

here N_t is a homogeneous Poisson process with the intensity $\lambda = 1$ and $(Y_j)_{j \geq 1}$ is i.i.d. Gaussian $(0, 1)$ (see, for example, [12]).

We use the model selection procedure (4.7) with the weights (4.14) in which $k^* = 100 + \sqrt{\ln(n+1)}$, $r_i = i / \ln(n+1)$, $m = [\ln^2(n+1)]$, $\varsigma^* = 0.5$ and $\rho = (3 + \ln n)^{-2}$. We define the empirical risk as

$$\bar{R}(\tilde{S}, S) = \frac{1}{P} \sum_{j=1}^P \hat{\mathbf{E}} \Delta_n^2(t_j) \quad \text{and} \quad \hat{\mathbf{E}} \Delta_n^2(t) = \frac{1}{N} \sum_{l=1}^N \Delta_{n,l}^2(t),$$

where $\Delta_n(t) = \tilde{S}_n(t) - S(t)$ and $\Delta_{n,l}(t) = \tilde{S}_n^l(t) - S(t)$ is the deviation for the l -th replication. In this example we take the frequency of observations $p = 100001$ and numbers of replications $N = 1000$.

Table 1 gives the values for the sample risks of the improved estimate (4.7) and the model selection procedure based on the weighted LSE (3.15) from [11] for different numbers of observation period n . Table 2 gives the values for the sample risks of the model selection procedure based on the weighted LSE (3.15) from [11] and its improved version for different numbers of observation period n .

Table 1

The sample quadratic risks for different optimal γ

n	100	200	500	1000
$\bar{R}(S_{\gamma}^*, S)$	0.0289	0.0089	0.0021	0.0011
$\bar{R}(\hat{S}_{\gamma}, S)$	0.0457	0.0216	0.0133	0.0098
$\bar{R}(\hat{S}_{\gamma}, S) / \bar{R}(S_{\gamma}^*, S)$	1.6	2.4	6.3	8.9

Table 2

The sample quadratic risks for same optimal $\hat{\gamma}$

n	100	200	500	1000
$\bar{R}(S_{\hat{\gamma}}^*, S)$	0.0391	0.0159	0.0098	0.0066
$\bar{R}(\hat{S}_{\hat{\gamma}}, S)$	0.0457	0.0216	0.0133	0.0098
$\bar{R}(\hat{S}_{\hat{\gamma}}, S) / \bar{R}(S_{\hat{\gamma}}^*, S)$	1.2	1.4	1.3	1.5

Remark 6.1. Figures 1 and 2 show the behaviour of the procedures (3.6) and (4.7) depending on the values of observation periods n . The bold line is the function (6.1), the continuous line is the model selection procedure based on the least squares estimators $\hat{S}$ and the dashed line is the improved model selection procedure S^* . From the Table 2 for the same $\hat{\gamma}$ with various observations numbers n one can conclude that theoretical result on the improvement effect (3.13) is confirmed by the numerical simulations. Moreover, for the proposed shrinkage procedure, Table 1 and Figures 1, 2, we can conclude that the gain is considerable for non-large n .

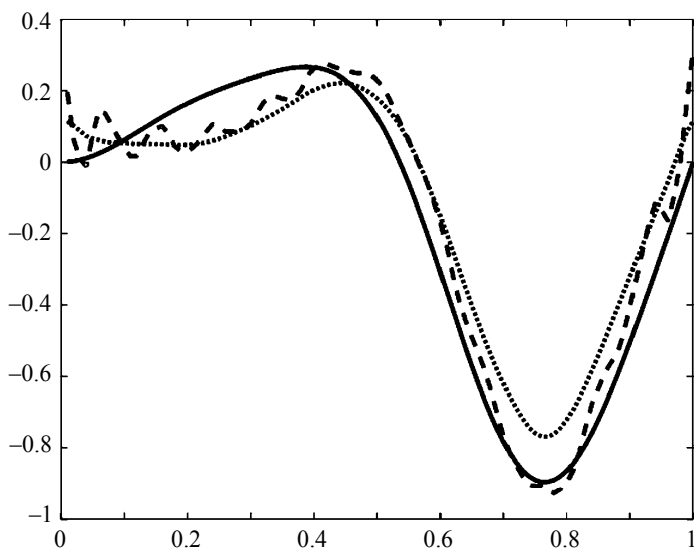


Fig. 1. Behavior of the regression function and its estimates for $n = 500$

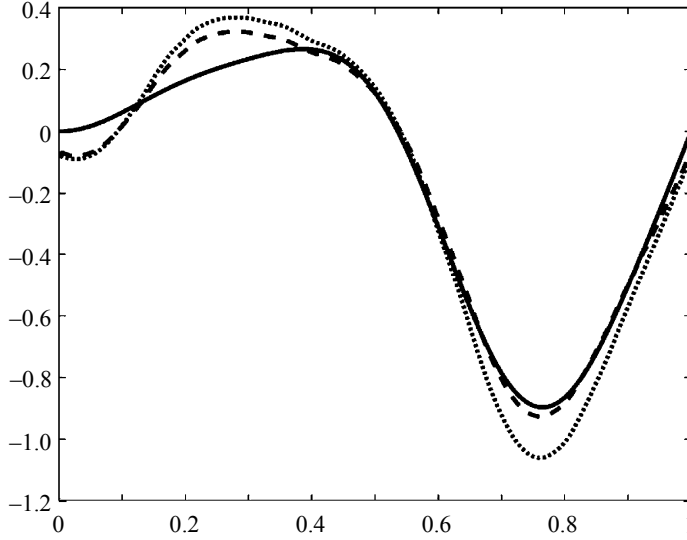


Fig. 2. Behavior of the regression function and its estimates for $n = 1000$

7. Proofs

7.1. Proof of Theorem 3.1. Consider the quadratic error of the estimates (3.12)

$$\begin{aligned}
 \|S_\gamma^* - S\|^2 &= \sum_{j=1}^n (\gamma(j)\theta_{j,n}^* - \theta_j)^2 = \sum_{j=1}^d (\gamma(j)\theta_{j,n}^* - \theta_j)^2 + \sum_{j=d+1}^n (\gamma(j)\hat{\theta}_{j,n} - \theta_j)^2 \\
 &= \sum_{j=1}^n (\gamma(j)\hat{\theta}_{j,n} - \theta_j)^2 + c_n^2 - 2c_n \sum_{j=d+1}^d (\hat{\theta}_{j,n} - \theta_j) \frac{\hat{\theta}_{j,n}}{\|\tilde{\theta}_n\|_d} \\
 &= \|\hat{S}_\gamma - S\|^2 + c_n^2 - 2c_n \sum_{j=d+1}^d (\hat{\theta}_{j,n} - \theta_j) \mathbf{1}_j(\tilde{\theta}_n),
 \end{aligned}$$

where $\mathbf{1}_j(x) = x_j / \|x\|_d$ for $x = (x_j)_{1 \leq j \leq d} \in \mathbb{R}^d$. Therefore the risk for the improved estimator S_γ^* can be represented as

$$\mathcal{R}_Q(S_\gamma^*, S) = \mathcal{R}_Q(\hat{S}_\gamma, S) + c_n^2 - 2c_n \mathbf{E}_{Q,S} \sum_{j=d+1}^d (\hat{\theta}_{j,n} - \theta_j) I_{j,n},$$

where $I_{j,n} = \mathbf{E}(\mathbf{1}_j(\tilde{\theta}_n)(\hat{\theta}_{j,n} - \theta_j) | \mathcal{G}_n)$. Now, taking into account that the vector $\tilde{\theta}_n = (\hat{\theta}_{j,n})_{1 \leq j \leq d}$ is the $\mathcal{G}_n$ -conditionally Gaussian in $\mathbb{R}^d$ with mean $\tilde{\theta} = (\theta_j)_{1 \leq j \leq d}$ and covariance matrix $n^{-1}\mathbf{G}_n$, we obtain

$$I_{j,n} = \int_{\mathbb{R}^d} \mathbf{1}_j(x)(x - \theta_j) \mathbf{p}(x | \mathcal{G}_n) dx.$$

Here $\mathbf{p}(x | \mathcal{G}_n)$ is the conditional distribution density of the vector $\tilde{\theta}_n$, i.e.

$$\mathbf{p}(x | \mathcal{G}_n) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2} \sqrt{\det \mathbf{G}_n}} \exp \left(-\frac{(x - \theta)' \mathbf{G}_n^{-1} (x - \theta)}{2} \right).$$

Changing the variables by $u = \mathbf{G}_n^{-1/2} (x - \theta)$ yields

$$I_{j,n} = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \sum_{l=1}^d g_{jl} \int_{\mathbb{R}^d} \tilde{\mathbf{v}}_{j,n}(u) u_l \exp \left(-\frac{\|u\|_d^2}{2} \right) du, \quad (7.1)$$

where $\tilde{\mathbf{v}}_{j,n}(u) = \mathbf{v}_j(\mathbf{G}_n^{1/2} u + \theta)$ and g_{ij} denotes (i, j) -th element of $\mathbf{G}_n^{1/2}$. Furthermore, integrating by parts, the integral $I_{j,n}$ can be rewritten as

$$I_{j,n} = \sum_{l=1}^d \sum_{k=1}^d \mathbf{E} \left(g_{jl} g_{kl} \frac{\partial \mathbf{v}_j}{\partial u_k}(u) \Big|_{u=\tilde{\theta}_n} \Big| \mathcal{G}_n \right).$$

Now, taking into account that $z'Az \leq \lambda_{\max}(A) \|z\|^2$ and the condition $\mathbf{D}_2$), we obtain that

$$\Delta_Q(S) = c_n^2 - 2c_n \mathbf{E}_{Q,S} \left(\frac{\text{tr} \mathbf{G}_n}{\|\tilde{\theta}_n\|_d} - \frac{\tilde{\theta}_n' \mathbf{G}_n \tilde{\theta}_n}{\|\tilde{\theta}_n\|^3} \right) \leq c_n^2 - 2c_n^* n^{-1} \mathbf{E}_{Q,S} \frac{1}{\|\tilde{\theta}_n\|_d}.$$

Recall, that the prime denotes the transposition. Moreover, in view of the Jensen inequality, we can estimate the last expectation from below as

$$\mathbf{E}_{Q,S} \left(\|\tilde{\theta}_n\|_d \right)^{-1} = \mathbf{E}_{Q,S} \left(\|\tilde{\theta} + n^{-1/2} \tilde{\xi}_n\|_d \right)^{-1} \geq \left(\|\theta_n\|_d + n^{-1/2} \mathbf{E}_{Q,S} \|\tilde{\xi}_n\|_d \right)^{-1}.$$

Now we note that the condition (1.3) implies that

$$\mathbf{E}_{Q,S} \|\tilde{\xi}_n\|_d^2 \leq \kappa_* d.$$

So, for $\|S\|^2 \leq r_n^*$

$$\mathbf{E}_{Q,S} \left(\|\tilde{\theta}_n\| \right)^{-1} \geq \left(r_n^* + \sqrt{d\kappa_*/n} \right)^{-1}$$

and therefore

$$\Delta_Q(S) = c_n^2 - 2c_n \frac{l_n^*}{\left(r_n^* + \sqrt{d\kappa_*/n} \right) n} \leq -c_n^2.$$

Hence Theorem 3.1.

7.2. Proof of Theorem 4.1. Substituting (4.4) in (4.1) yields for any

$$\text{Err}_n(\gamma) = J(\gamma) + 2 \sum_{j=1}^n \gamma(j) \left(\theta_{j,n}^* \hat{\theta}_{j,n} - \frac{\hat{\sigma}_n}{n} - \theta_{j,n}^* \theta_j \right) + \|S\|^2 - \rho \hat{P}_n(\gamma). \quad (7.2)$$

Now we set $L(\gamma) = \sum_{j=1}^n \gamma(j)$,

$$B_{1,n}(\gamma) = \sum_{j=1}^n \gamma(j) \left(\mathbf{E}_Q \xi_{j,n}^2 - \sigma_Q \right), \quad B_{2,n}(\gamma) = \sum_{j=1}^n \gamma(j) \tilde{\xi}_{j,n},$$

$$M(\gamma) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{j=1}^n \gamma(j) \theta_j \xi_{j,n} \quad \text{and} \quad B_{3,n}(\gamma) = \frac{1}{\sqrt{n}} \sum_{j=1}^n \gamma(j) g(j) \hat{\theta}_{j,n} \xi_{j,n}.$$

Taking into account the definition (4.5), we can rewrite (7.2) as

$$\begin{aligned} \text{Err}_n(\gamma) = & J(\gamma) + 2 \frac{\sigma_Q - \hat{\sigma}_n}{n} L(\gamma) + 2M(\gamma) + \frac{2}{n} B_{1,n}(\gamma) \\ & + 2\sqrt{P_n(\gamma)} \frac{B_{2,n}(\bar{\gamma})}{\sqrt{\sigma_Q n}} - 2B_{3,n}(\gamma) + \|\mathcal{S}\|^2 - \rho \hat{P}_n(\gamma) \end{aligned} \quad (7.3)$$

with $\bar{\gamma} = \gamma/|\gamma|_n$. Let $\gamma_0 = (\gamma_0(j))_{1 \leq j \leq n}$ be a fixed sequence in Γ and γ^* be as in (4.6).

Substituting γ_0 and γ^* in (7.3), we consider the difference

$$\begin{aligned} \text{Err}_n(\gamma^*) - \text{Err}_n(\gamma_0) \leq & 2 \frac{\sigma_Q - \hat{\sigma}_n}{n} L(x) + 2M(x) + \frac{2}{n} B_{1,n}(x) + 2\sqrt{P_n(\gamma^*)} \frac{B_{2,n}(\bar{\gamma}^*)}{\sqrt{\sigma_Q n}} \\ & - 2\sqrt{P_n(\gamma_0)} \frac{B_{2,n}(\bar{\gamma}_0)}{\sqrt{\sigma_Q n}} - 2B_{3,n}(\gamma^*) + 2B_{3,n}(\gamma_0) - \rho \hat{P}_n(\gamma^*) + \rho \hat{P}_n(\gamma_0), \end{aligned}$$

where $x = \gamma^* - \gamma_0$. Note that $L(x) \leq 2|\Gamma|_*$ and $|B_{1,n}(x)| \leq L_{1,n}(Q)$. Applying the elementary inequality

$$2|ab| \leq \varepsilon a^2 + \varepsilon^{-1} b^2 \quad (7.4)$$

with any $\varepsilon > 0$, we get

$$2\sqrt{P_n(\gamma)} \frac{B_{2,n}(\bar{\gamma})}{\sqrt{\sigma_Q n}} \leq \varepsilon P_n(\gamma) + \frac{B_{2,n}^2(\bar{\gamma})}{\varepsilon \sigma_Q n} \leq \varepsilon P_n(\gamma) + \frac{B_2^*}{\varepsilon \sigma n},$$

where

$$B_2^* = \max_{\gamma \in \Gamma} (B_{2,n}^2(\bar{\gamma}) + B_{2,n}^2(\bar{\gamma}^2))$$

with $\gamma^2 = (\gamma_j^2)_{1 \leq j \leq n}$. Note that from the definition of function $L_{2,n}(Q)$ in the condition $\mathbf{C}_2$) it follows that

$$\mathbf{E}_Q B_2^* \leq \sum_{\gamma \in \Gamma} (\mathbf{E}_Q B_{2,n}^2(\bar{\gamma}) + \mathbf{E}_Q B_{2,n}^2(\bar{\gamma}^2)) \leq 2\nu L_{2,n}(Q). \quad (7.5)$$

Moreover, by the same argument one can estimate the term $B_{3,n}$. Note that

$$\sum_{j=1}^n g_\gamma^2(j) \hat{\theta}_j^2 = c_n^2 \leq \frac{c_n^*}{n}, \quad (7.6)$$

where $c_n^* = n \max_{\gamma \in \Gamma} c_n^2$. Therefore by the Cauchy–Schwarz inequality, we can estimate the term $B_{3,n}(\gamma)$ as

$$|B_{3,n}(\gamma)| \leq \frac{|\gamma|_n}{\sqrt{n}} c_n \left(\sum_{j=1}^n \bar{\gamma}^2(j) \xi_j^2 \right)^{1/2} = \frac{|\gamma|_n}{\sqrt{n}} c_n (\sigma_Q + B_{2,n}(\bar{\gamma}^2))^{1/2}.$$

So, applying the elementary inequality (7.4) with some arbitrary $\varepsilon > 0$, we have

$$2|B_{3,n}(\gamma)| \leq \varepsilon P_n(\gamma) + \frac{c_n^*}{\varepsilon \sigma_Q n} (\sigma_Q + B_2^*).$$

Using the bounds, one has

$$\begin{aligned} \text{Err}_n(\gamma^*) &\leq \text{Err}_n(\gamma_0) + \frac{4|\Gamma|_*|\sigma_Q - \hat{\sigma}_n|}{n}L(x) + 2M(x) + \frac{2}{n}\mathbf{L}_{1,n}(Q) \\ &+ \frac{2}{\varepsilon} \frac{c^*}{\sigma_Q n}(\sigma_Q + B_2^*) + \frac{2}{\varepsilon} \frac{B_2^*}{\sigma_Q n} + 2\varepsilon P_n(\gamma^*) + 2\varepsilon P_n(\gamma_0) - \rho \hat{P}_n(\gamma^*) + \rho \hat{P}_n(\gamma_0). \end{aligned}$$

Setting $\varepsilon = \rho/4$ and substituting $\rho = 1$ (where it is possible) we have

$$\begin{aligned} \text{Err}_n(\gamma^*) &\leq \text{Err}_n(\gamma_0) + \frac{5|\Gamma|_*|\sigma_Q - \hat{\sigma}_n|}{n} + 2M(x) + \frac{2}{n}\mathbf{L}_{1,n}(Q) \\ &+ \frac{16(c^* + 1)(\sigma_Q + B_2^*)}{\rho\sigma_Q n} - \frac{\rho}{2}\hat{P}_n(\gamma^*) + \frac{\rho}{2}P_n(\gamma_0) + \frac{\rho}{2}\hat{P}_n(\gamma_0). \end{aligned}$$

Moreover, taking into account here that

$$|\hat{P}_n(\gamma_0) - P_n(\gamma_0)| \leq \frac{|\Gamma|_*|\sigma_Q - \hat{\sigma}_n|}{n}$$

and that $\rho < 1/2$, we obtain that

$$\begin{aligned} \text{Err}_n(\gamma^*) &\leq \text{Err}_n(\gamma_0) + \frac{6|\Gamma|_*|\sigma_Q - \hat{\sigma}_n|}{n} + 2M(x) + \frac{2}{n}\mathbf{L}_{1,n}(Q) \\ &+ \frac{16(c^* + 1)(\sigma_Q + B_2^*)}{\rho\sigma_Q n} - \frac{\rho}{2}P_n(\gamma^*) + \frac{3\rho}{2}P_n(\gamma_0). \end{aligned} \quad (7.7)$$

Now we estimate the third term in the right-hand side if this inequality. Firstly, we note that

$$2|M(x)| \leq \varepsilon \|S_x\|^2 + \frac{Z^*}{n\varepsilon}, \quad (7.8)$$

where $S_x = \sum_{j=1}^n x_j \theta_j \phi_j$ and

$$Z^* = \sup_{x \in \Gamma_1} \frac{nM^2(x)}{\|S_x\|^2}.$$

with the set $\Gamma_1 = \Gamma - \gamma_0$. Using Proposition 7.1 from [17], we can obtain that for any fixed $x = (x_j)_{1 \leq j \leq d} \in \mathbb{R}^d$.

$$\mathbf{E}M^2(x) = \frac{\mathbf{E}I_n^2(S_x)}{n^2} = \frac{\sigma_Q \|S_x\|^2}{n} = \frac{\sigma_Q}{n} \sum_{j=1}^n x_j^2 \theta_j^2 \quad (7.9)$$

and therefore

$$\mathbf{E}_Q Z^* \leq \sum_{x \in \Gamma_1} \frac{nM^2(x)}{\|S_x\|^2} \leq \sigma_Q v. \quad (7.10)$$

The norm $\|S_{\gamma^*}^* - S_{\gamma_0}^*\|$ can be estimated from below as

$$\|S_{\gamma^*}^* - S_{\gamma_0}^*\| = \left\| \sum_{j=1}^n (x(j) + \beta(j)) \hat{\theta}_j^2 \right\| \geq \|\hat{S}_x\|^2 + 2 \sum_{j=1}^n x(j) \beta(j) \hat{\theta}_j^2,$$

where $\beta(j) = \gamma_0(j)g_j(\gamma_0) - \gamma(j)g_j(\gamma)$. Therefore, in view of (3.5),

$$\begin{aligned} \|S_x\|^2 - \|S_\gamma^* - S_{\gamma_0}^*\|^2 &\leq \|S_x\|^2 - \|\hat{S}_x\|^2 - 2 \sum_{j=1}^n x(j)\beta(j)\hat{\theta}_j^2 \\ &\leq -2M(x^2) - 2 \sum_{j=1}^n x(j)\beta(j)\hat{\theta}_j\theta_j - \frac{2}{\sqrt{n}}\Upsilon(x), \end{aligned}$$

where $\Upsilon(\gamma) = \sum_{j=1}^n \gamma(j)\beta(j)\hat{\theta}_j\xi_j$. Note that the first term in this inequality can be estimated as

$$2M(x^2) \leq \varepsilon \|S_x\|^2 + \frac{Z_1^*}{n\varepsilon} \quad \text{and} \quad Z_1^* = \sup_{x \in \Gamma_1} \frac{nM^2(x^2)}{\|S_x\|^2}.$$

Note that, similarly to (7.10) one can estimate the last term as

$$\mathbf{E}_Q Z_1^* \leq \sigma_Q v.$$

From here it follows that, for any $0 < \varepsilon < 1$,

$$\|S_x\|^2 \leq \frac{1}{1-\varepsilon} \left(\|S_\gamma^* - S_{\gamma_0}^*\|^2 + \frac{Z_1^*}{n\varepsilon} - 2 \sum_{j=1}^n x(j)\beta(j)\hat{\theta}_j\theta_j - \frac{2}{\sqrt{n}}\Upsilon(x) \right). \quad (7.11)$$

Further we note that the property (7.6) yields

$$\sum_{j=1}^n \beta^2(j)\hat{\theta}_j^2 \leq 2 \sum_{j=1}^n g_\gamma^2(j)\hat{\theta}_j^2 + 2 \sum_{j=1}^n g_{\gamma_0}^2(j)\hat{\theta}_j^2 \leq \frac{4c^*}{n\varepsilon}. \quad (7.12)$$

Given $|x(j)| \leq 1$ and using the inequality (7.4), we get that for any $\varepsilon > 0$

$$2 \left| \sum_{j=1}^n x(j)\beta(j)\hat{\theta}_j\theta_j \right| \leq \varepsilon \|S_x\|^2 + \frac{4c^*}{n\varepsilon}.$$

To estimate the last in the right hand of (7.11) we use first the Cauchy-Schwartz inequality and then the bound (7.12), i.e.

$$\begin{aligned} \frac{2}{\sqrt{n}} |\Upsilon(\gamma)| &\leq \frac{2|\Gamma|_*}{\sqrt{n}} \left(\sum_{j=1}^n \beta^2(j)\hat{\theta}_j^2 \right)^{1/2} \left(\sum_{j=1}^n \bar{\gamma}^2(j)\xi_j^2 \right)^{1/2} \\ &\leq \varepsilon P_n(\gamma) + \frac{c^*}{\varepsilon \sigma n} \sum_{j=1}^n \bar{\gamma}^2(j)\xi_j^2 \leq \varepsilon P_n(\gamma) + \frac{c^*(\sigma_Q + B_2^*)}{\varepsilon \sigma_Q n}. \end{aligned}$$

Therefore,

$$\frac{2}{\sqrt{n}} |\Upsilon(\gamma)| \leq \frac{2}{\sqrt{n}} |\Upsilon(\gamma^*)| + \frac{2}{\sqrt{n}} |\Upsilon(\gamma_0)| \leq \varepsilon P_n(\gamma^*) + \varepsilon P_n(\gamma_0) + \frac{2c^*(\sigma_Q + B_2^*)}{\varepsilon \sigma_Q n}.$$

Combining all these bounds in (7.11), we obtain that

$$\|S_x\|^2 \leq \frac{1}{1-\varepsilon} \left(\frac{Z_1^*}{n\varepsilon} + \|S_\gamma^* - S_{\gamma_0}^*\|^2 + \frac{6c_n^*(\sigma + B_2^*)}{\varepsilon \sigma n} + \varepsilon P_n(\gamma^*) + \varepsilon P_n(\gamma_0) \right).$$

Using (7.8) and this bound

$$\left\| S_{\gamma}^* - S_{\gamma_0}^* \right\|^2 \leq 2 \left(\text{Err}_n(\gamma^*) + \text{Err}_n(\gamma_0) \right),$$

we have

$$2|M(x)| \leq \frac{Z^* + Z_1^*}{n(1-\varepsilon)\varepsilon} + \frac{2\varepsilon(\text{Err}_n(\gamma^*) + \text{Err}_n(\gamma_0))}{1-\varepsilon} + \frac{6c_n^*(\sigma_Q + B_2^*)}{n\sigma_Q(1-\varepsilon)} + \frac{\varepsilon^2}{1-\varepsilon} (P_n(\gamma^*) + P_n(\gamma_0)).$$

Choosing here $\varepsilon \leq \rho/2 < 1/2$ we have that

$$2|M(x)| \leq \frac{2(Z^* + Z_1^*)}{n\varepsilon} + \frac{2\varepsilon(\text{Err}_n(\gamma^*) + \text{Err}_n(\gamma_0))}{1-\varepsilon} + \frac{12c_n^*(\sigma_Q + B_2^*)}{n\sigma_Q} + \varepsilon(P_n(\gamma^*) + P_n(\gamma_0)).$$

From here and (7.7), it follows that

$$\begin{aligned} \text{Err}_n(\gamma^*) &\leq \frac{1+\varepsilon}{1-3\varepsilon} \text{Err}_n(\gamma_0) + \frac{6|\Gamma|_* |\sigma_Q - \hat{\sigma}_n|}{n(1-3\varepsilon)} + \frac{2L_{1,n}(Q)}{n(1-3\varepsilon)} \\ &\quad + \frac{28(1+c_n^*)(\sigma_Q + B_2^*)}{\rho(1-3\varepsilon)n\sigma_Q} + \frac{2(Z^* + Z_1^*)}{n(1-3\varepsilon)} + \frac{2\rho P_n(\gamma_0)}{1-3\varepsilon}. \end{aligned}$$

Choosing here $\varepsilon = \rho/3$ and estimating $(1-\rho)^{-1}$ by 2 where this is possible, we get

$$\begin{aligned} \text{Err}_n(\gamma^*) &\leq \frac{1+\rho/3}{1-\rho} \text{Err}_n(\gamma_0) + \frac{12|\Gamma|_* |\sigma_Q - \hat{\sigma}_n|}{n(1-3\varepsilon)} + \frac{4}{n} L_{1,n}(Q) \\ &\quad + \frac{56(1+c_n^*)(\sigma_Q + B_2^*)}{\rho n\sigma_Q} + \frac{4(Z^* + Z_1^*)}{n} + \frac{2\rho P_n(\gamma_0)}{1-\rho}. \end{aligned}$$

Taking the expectation and using the upper bound for $P_n(\gamma_0)$ in Lemma 7.1 with $\varepsilon = \rho$ yields

$$\mathcal{R}_Q(S^*, S) \leq \frac{1+5\rho}{1-\rho} \mathcal{R}_Q(S_{\gamma_0}^*, S) + \frac{\check{U}_{Q,n}}{n\rho} + \frac{12|\Gamma|_* \mathbf{E}_Q |\sigma_Q - \hat{\sigma}_n|}{n},$$

where $\check{U}_{Q,n} = 4L_{1,n}(Q) + 56(1+c_n^*)(2L_{2,n}(Q)v+1) + 2c_n^*$. Since this inequality holds for each $\gamma_0 \in \Lambda$, this implies Theorem 4.1.

7.3. Property of Penalty term

Lemma 7.1. For any $n \geq 1$, $\gamma \in \Gamma$ and $0 < \varepsilon < 1$

$$P_n(\gamma) \leq \frac{\mathbf{E} \text{Err}_n(\gamma)}{1-\varepsilon} + \frac{c_n^*}{n\varepsilon(1-\varepsilon)}. \quad (7.13)$$

Proof. By the definition of $\text{Err}_n(\gamma)$ one has

$$\begin{aligned} \text{Err}_n(\gamma) &= \sum_{j=1}^n (\gamma(j)\theta_{j,n}^* - \theta_j)^2 = \sum_{j=1}^n \gamma(j) \left((\theta_{j,n}^* - \theta_j) + (\gamma(j)-1)\theta_j \right)^2 \\ &\geq \sum_{j=1}^n \gamma(j)^2 (\theta_{j,n}^* - \theta_j)^2 + \sum_{j=1}^n \gamma(j)(\gamma(j)-1)\theta_j (\theta_{j,n}^* - \theta_j). \end{aligned}$$

By the condition $\mathbf{B}_2$) and the definition (3.10) we obtain that the last term in the sum can be replaced as

$$\sum_{j=1}^n \gamma(j)(\gamma(j)-1)\theta_j(\theta_{j,n}^* - \theta_j) = \sum_{j=1}^n \gamma(j)(\gamma(j)-1)\theta_j(\hat{\theta}_{j,n} - \theta_j),$$

i.e. $\mathbf{E} \sum_{j=1}^n \gamma(j)(\gamma(j)-1)\theta_j(\theta_{j,n}^* - \theta_j) = 0$ and, therefore, taking into account the definition (4.12), we obtain that

$$\begin{aligned} \text{Err}_n(\gamma) &\geq \sum_{j=1}^n \gamma(j)^2 \mathbf{E}(\theta_{j,n}^* - \theta_j)^2 = \sum_{j=1}^n \gamma(j)^2 \mathbf{E} \left(\frac{\xi_{j,n}}{\sqrt{n}} - g_\gamma(j) \hat{\theta}_j \right)^2 \\ &\geq P_n(\gamma) - \frac{2}{\sqrt{n}} \mathbf{E} \sum_{j=1}^n \gamma(j)^2 g_\gamma(j) \hat{\theta}_{j,n} \xi_j \geq (1-\varepsilon) P_n(\gamma) - \frac{1}{\varepsilon} \mathbf{E} \sum_{j=1}^n g_\gamma^2(j) \hat{\theta}_j^2. \end{aligned}$$

The inequality (7.6) implies the bound (7.13). Hence Lemma 7.1.

REFERENCES

1. Barndorff-Nielsen O.E., Shephard N. Non-Gaussian Ornstein-Uhlenbeck-based models and some of their uses in financial mathematics // J. Royal Stat. Soc. 2001. B 63. P. 167–241.
2. Bertoin J. Lévy Processes. Cambridge: Cambridge University Press, 1996.
3. Cont R., Tankov P. Financial Modelling with Jump Processes. London: Chapman & Hall, 2004.
4. Fourdrinier D., Pergamenschchikov S. Improved selection model method for the regression with dependent noise // Annals of the Institute of Statistical Mathematics. 2007. V. 59(3). P. 435–464.
5. Galtchouk L., Pergamenschchikov S. Sharp non-asymptotic oracle inequalities for non-parametric heteroscedastic regression models // Journal of Nonparametric Statistics. 2009. V. 21(1). P. 1–16.
6. Galtchouk L., Pergamenschchikov S. Adaptive asymptotically efficient estimation in heteroscedastic nonparametric regression // Journal of Korean Statistical Society. 2009. V. 38(4). P. 305–322.
7. James W., Stein C. Estimation with quadratic loss // Proceedings of the Fourth Berkeley Symposium Mathematics, Statistics and Probability. Berkeley: University of California Press, 1961. V. 1. P. 361–380.
8. Konev V.V., Pergamenschchikov S.M. Nonparametric estimation in a semimartingale regression model. Part 1. Oracle Inequalities // Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics. 2009. No. 3(7). P. 23–41.
9. Konev V.V., Pergamenschchikov S.M. Nonparametric estimation in a semimartingale regression model. Part 2. Robust asymptotic efficiency // Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics. 2009. No. 4(8). P. 31–45.
10. Konev V.V., Pergamenschchikov S.M. General model selection estimation of a periodic regression with a Gaussian noise // Annals of the Institute of Statistical Mathematics. 2010. V. 62. P. 1083–1111.
11. Konev V.V., Pergamenschchikov S.M. Efficient robust nonparametric in a semimartingale regression model // Annals of the Institute of Henri Poincaré. Probab. and Stat. 2012. V. 48(4). P. 1217–1244.
12. Konev V.V., Pergamenschchikov S.M. Robust model selection for a semimartingale continuous time regression from discrete data // Stochastic processes and their applications. 2015. V. 125. P. 294–326.
13. Konev V., Pergamenschchikov S. and Pchelintsev E. Estimation of a regression with the pulse type noise from discrete data // Theory Probab. Appl. 2014. V. 58(3). P. 442–457.

14. Pchelintsev E. Improved estimation in a non-Gaussian parametric regression // Stat. Inference Stoch. Process. 2013. V. 16(1). P. 15–28.
15. Pchelintsev E., Pergamenshchikov S. Oracle inequalities for the stochastic differential equations // Stat. Inference Stoch. Process. 2018. V. 21 (2). P. 469–483.
16. Pchelintsev E.A., Pchelintsev V.A., Pergamenshchikov S.M. Non asymptotic sharp oracle inequality for the improved model selection procedures for the adaptive nonparametric signal estimation problem // Communications – Scientific Letters of the University of Zilina. 2018. V. 20 (1). P. 72–76.
17. Pchelintsev E., Pergamenshchikov S. Adaptive model selection method for a conditionally Gaussian semimartingale regression in continuous time. 2018. P. 1-50. Preprint: <http://arxiv.org/abs/1811.05319>.
18. Povzun M.A., Pchelintsev E.A. Estimating parameters in a regression model with dependent noises // Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics. 2017. No. 49. P. 43–51.

Received: November 13, 2018

Pchelintsev E. A., Pergamenshchikov S. M. (2019) IMPROVED MODEL SELECTION METHOD FOR AN ADAPTIVE ESTIMATION IN SEMIMARTINGALE REGRESSION MODELS. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 58. pp. 14–31

AMS Mathematical Subject Classification: 62G08; 62G05

Пчелинцев Е.А., Пергаменщикова С.М. (2019) УЛУЧШЕННЫЙ МЕТОД ВЫБОРА МОДЕЛИ ДЛЯ АДАПТИВНОГО ОЦЕНИВАНИЯ В СЕМИМАРТИНГАЛЬНЫХ РЕГРЕССИОННЫХ МОДЕЛЯХ. *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. № 58. С. 14–31

DOI 10.17223/19988621/58/2

Ключевые слова: улучшенное неасимптотическое оценивание, оценки наименьших квадратов, робастный квадратический риск, непараметрическая регрессия, семимартингальный шум, процесс Орнштейна – Уленбека – Леви, выбор модели, точное оракульное неравенство, асимптотическая эффективность.

Рассматривается задача робастного адаптивного эффективного оценивания периодической функции в непрерывной модели регрессии с зависимыми шумами, задаваемыми общим квадратично интегрируемым семимартингалом с условно-гауссовским распределением. Примером такого шума являются негауссовские процессы Орнштейна – Уленбека – Леви. Предложена адаптивная процедура выбора модели на основе улучшенных взвешенных оценок наименьших квадратов. При некоторых условиях на распределение шума доказано точно оракульное неравенство для робастного риска и установлена робастная эффективность процедуры выбора модели. Приводятся результаты численного моделирования.

Финансовая поддержка: Работа выполнена при поддержке РФФИ, Грант № 17-11-01049.

Благодарности. Работа частично выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки № 2.3208.2017/4.6. Работа второго автора частично выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки № 1.472.2016/1.4.

PCHELINTSEV Evgeny Anatolievich, Candidate of Physics and Mathematics, Department of Mathematics and Mechanics, National Research Tomsk State University, Tomsk, Russia. E-mail: evgen-pch@yandex.ru

PERGAMENSHCHIKOV Serguei Markovich, Doctor of Physics and Mathematics, Laboratory of Mathematics Raphael Salem, University of Rouen Normandy, France. E-mail: serge.pergamenchchikov@univ-rouen.fr

О.И. Рудницкий

КАНОНИЧЕСКАЯ СИСТЕМА БАЗИСНЫХ ИНВАРИАНТОВ УНИТАРНОЙ ГРУППЫ $W(K_5)$

Продолжена работа по построению канонических систем базисных инвариантов для конечных унитарных примитивных групп, порождённых отражениями. А именно: построена в явном виде каноническая система базисных инвариантов для конечной унитарной примитивной группы $W(K_5)$, порождённой отражениями, в пятимерном унитарном пространстве.

Ключевые слова: унитарное пространство, отражение, группа отражений, алгебра инвариантов, базисный инвариант, каноническая система.

Пусть в n -мерном унитарном пространстве U^n задана координатная система началом O и ортонормированным базисом e_i ($i = \overline{1, n}$); вектор $x = \{x_1, \dots, x_n\}$. Отражением σ порядка l в пространстве U^n называется унитарное преобразование порядка l , множество неподвижных точек которого является плоскостью размерности $n - 1$. Эту плоскость называют гиперплоскостью отражения или симметрии. Обозначим через G конечную неприводимую группу, порождённую отражениями σ относительно гиперплоскостей с общей точкой O . Классификация групп G впервые получена в работе [1].

Действие группы G в кольце $R = \mathbb{C}[x_1, \dots, x_n]$ многочленов от n переменных над полем комплексных чисел определим с помощью равенства $g \cdot f = f(g^{-1}x)$, где $g \in G$ и $f = f(x) = f(x_1, \dots, x_n) \in R$. Многочлен $f \in R$ называется инвариантом группы G или G -инвариантом, если $g \cdot f = f$ для всех $g \in G$.

Множество всех G -инвариантных многочленов $f \in R$ образует алгебру I^G , которая порождается n алгебраически независимыми однородными многочленами f_i степеней m_i ($i = \overline{1, n}$) [1]; не нарушая общности, будем считать, что $m_1 \leq m_2 \leq \dots \leq m_n$. Система многочленов $\{f_1, \dots, f_n\}$ называется системой базисных инвариантов группы G .

Для заданной группы G система базисных инвариантов определяется неоднозначно, но их степени (числа m_i) определяются однозначно и называются показателями группы. Выдвинув дополнительные условия, можно среди бесконечного множества систем базисных инвариантов выбрать особые базисы, удовлетворяющие ранее выдвинутому условию.

Так, Л. Флатто (см., например, [2]) при изучении свойства среднего значения для непрерывных вещественных функций рассматривал специальные системы базисных инвариантов для конечных вещественных групп G , порождённых отражениями, в вещественном евклидовом пространстве. Такие системы базисных инвариантов в [3] были названы «каноническими системами базисных инвариантов».

тов». В работе [4] понятие «канонической системы базисных инвариантов» было перенесено на группы G унитарного пространства U^n , а также предложен метод построения канонических систем, который в [5] был реализован при построении канонической системы базисных инвариантов для бесконечного семейства импримитивных групп $G(m, p, n)$.

Ранее (см. [6 – 9]) автором был реализован другой метод построения в явном виде канонических систем базисных инвариантов для конечных унитарных примитивных групп, порождённых отражениями в пространствах U^n размерности $n = 2, 3, 4$.

В настоящей статье приведен метод построения в явном виде канонической системы базисных инвариантов для группы $W(K_5)$ – единственной конечной унитарной примитивной не вещественной группы, порождённой отражениями в пространстве U^5 .

Постановка задачи

Система $\{f_1, \dots, f_n\}$ базисных инвариантов группы G называется **канонической системой**, если она удовлетворяет следующей системе дифференциальных уравнений в частных производных [4]:

$$\bar{f}_i(\partial)f_j = 0, i, j = \overline{1, n} \ (i < j), \quad (1)$$

где дифференциальный оператор $\bar{f}_i(\partial)$ получается из многочлена f_i заменой всех его коэффициентов на комплексно сопряжённые, а переменных x_k – на $\frac{\partial}{\partial x_k}$.

Цель настоящей работы – построить в явном виде каноническую систему базисных инвариантов для унитарной группы $W(K_5)$, порождённой отражениями в пространстве U^5 , и, таким образом, с учётом результатов работ [6 – 9], завершить построение в явном виде канонических систем базисных инвариантов всех конечных унитарных примитивных групп G , порождённых отражениями, в пространствах U^n размерности $n \leq 5$.

Схема предложенного и реализованного в [6 – 9] метода (см. также [10]) состоит в следующем:

1. Возьмём известную систему $\{J_{m_1}, \dots, J_{m_n}\}$ базисных инвариантов группы G (см., например, [11]).

2. Построим новую систему базисных G -инвариантных многочленов $\tilde{I}_{m_p}$ ($p = \overline{1, n}$) в виде многочленов подходящей степени с неопределёнными коэффициентами a_α от базисных инвариантов J_{m_k} . Так как многочлен $\tilde{I}_{m_p}$ должен быть базисным, то форма J_{m_p} должна обязательно присутствовать в записи этого многочлена.

3. Подставляя в многочлены $\tilde{I}_{m_p}$ явные выражения базисных инвариантов J_{m_k} , получим однородные многочлены I_{m_p} степени m_p относительно перемен-

ных $x_1, \dots, x_n$. При этом коэффициент у каждого одночлена формы I_{m_p} есть линейная комбинация неопределённых коэффициентов a_α .

4. Обозначим $f_1 = I_{m_1} = J_{m_1}$ и последовательно применим условие (1) к формам $I_{m_p}, p > 1$.

5. На каждом шаге уравнения (1) приводят к системе линейных однородных уравнений относительно неопределённых коэффициентов a_α . Находим общее решение полученной системы линейных уравнений и вводим обозначение $f_p = \hat{I}_{m_p}, p > 1$, где $\hat{I}_{m_p}$ – форма I_{m_p} для найденных значений a_α .

Построенная таким образом система базисных инвариантов $\{f_1, \dots, f_n\}$ является **канонической системой**.

Для вычислений может быть использован программный пакет, например система компьютерной алгебры Maple.

Каноническая система для группы $W(K_5)$

В пространстве U^5 существует только одна конечная не вещественная примитивная группа G , порождённая отражениями. Это группа $W(K_5)$ порядка $72 \cdot 6!$, порождённая отражениями второго порядка относительно 45 4-мерных плоскостей [1].

Введём в пространстве U^5 ортонормированную систему координат с началом O и ортонормированным базисом $\mathbf{e}_i$ ($i = \overline{1, 5}$); вектор $\mathbf{x} = \sum_{i=1}^5 x_i \mathbf{e}_i$. Тогда группа $W(K_5)$ порождается отражениями второго порядка относительно 4-плоскостей с уравнениями [12]

$$x_1 - \omega^2 x_2 = 0, x_t - x_{t+1} = 0 (t = \overline{1, 3}), x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + \sqrt{2} x_5 = 0,$$

где $\omega = -\frac{1}{2} + \varepsilon \frac{\sqrt{3}}{2}$ – первообразный корень третьей степени из единицы; $\varepsilon = \sqrt{-1}$.

Уравнения всех 45 4-мерных плоскостей, отражения относительно которых принадлежат группе $W(K_5)$, имеют вид

$$x_i - \omega^{k_0} x_j = 0, \sum_{i=1}^4 \omega^{k_i} x_i + \sqrt{2} \omega^{k_5} x_5 = 0,$$

где $\sum_{i=1}^4 k_i + 2k_5 \equiv 0 \pmod{3}, i, j = \overline{1, 4} (i < j); k_0, k_i, k_5 = \overline{1, 3}$.

Множество их нормальных векторов (система корней группы) состоит из 270 векторов

$$\pm \frac{\varepsilon \omega^t}{\sqrt{2}} (\mathbf{e}_i - \omega^{k_0} \mathbf{e}_j), \pm \frac{\omega^t}{\sqrt{6}} (\sum_{i=1}^4 \omega^{k_i} \mathbf{e}_i + \sqrt{2} \omega^{k_5} \mathbf{e}_5), t = \overline{1, 3},$$

и инвариантно относительно группы $W(K_5)$ [12]. Степени $m_i = 4, 6, 10, 12, 18$ [1].

В работах [11, 12], используя многочлены Погорелова [11], автор построил следующую систему базисных инвариантов группы $W(K_5)$:

$$J_4 = 12 \prod x_i + x_5^4 - 2\sqrt{2}x_5 \sum x_i^3; \quad (2)$$

$$J_6 = -\sum x_i^6 + 10 \sum_{i < j} x_i^3 x_j^3 + x_5^6 + 5\sqrt{2}x_5^3 \sum x_i^3 + 90x_5^2 \prod x_i; \quad (3)$$

$$J_{10} = 2(-\sum x_i^6 + \sum_{i < j} x_i^3 x_j^3 + 4x_5^6 - \sqrt{2}x_5^3 \sum x_i^3) \prod x_i - 4x_5^4 \sum_{i < j} x_i^3 x_j^3 + \\ + 18x_5^2 \prod x_i^2 - \sqrt{2}x_5 (\sum x_i^6 x_j^3 - 6 \sum_{i < j < k} x_i^3 x_j^3 x_k^3);$$

$$J_{12} = 61 \sum x_i^{12} - 4400 \sum x_i^9 x_j^3 + 18942 \sum_{i < j} x_i^6 x_j^6 + 4620 \sum_{j < k} x_i^6 x_j^3 x_k^3 + 92400 \prod x_i^3 + \\ + 16x_5^{12} + 880\sqrt{2}x_5^2 \sum x_i^3 + 47520x_5^8 \prod x_i + 1848x_5^6 (\sum x_i^6 + 20 \sum_{i < j} x_i^3 x_j^3) + \\ + 166320\sqrt{2}x_5^5 (\sum x_i^3) \prod x_i + 1247400x_5^4 \prod x_i^2 + 110\sqrt{2}x_5^3 (\sum x_i^9 + 84 \sum x_i^6 x_j^3 + \\ + 1680 \sum_{i < j < k} x_i^3 x_j^3 x_k^3) + 5940x_5^2 (4 \sum x_i^6 + 35 \sum_{i < j} x_i^3 x_j^3) \prod x_i + 124740\sqrt{2}x_5 (\sum x_i^3) \prod x_i^2;$$

$$J_{18} = 820 \sum x_i^{18} - 223176 \sum x_i^{15} x_j^3 + 5072613 \sum x_i^{12} x_j^6 - 13297570 \sum_{i < j} x_i^9 x_j^9 - \\ - 46410 \sum_{j < k} x_i^{12} x_j^3 x_k^3 - 510510 \sum x_i^9 x_j^6 x_k^3 - 2144142 \sum_{i < j < k} x_i^6 x_j^6 x_k^6 - \\ - 2042040 (5 \sum x_i^6 + 21 \sum_{i < j} x_i^3 x_j^3) \prod x_i^3 - 64x_5^{18} - 13056\sqrt{2}x_5^{15} \sum x_i^3 - \\ - 1175040x_5^{14} \prod x_i - 148512x_5^{12} (\sum x_i^6 + 20 \sum_{i < j} x_i^3 x_j^3) - 26732160\sqrt{2}x_5^{11} (\sum x_i^3) \prod x_i - \\ - 441080640x_5^{10} \prod x_i^2 - 97240\sqrt{2}x_5^9 (\sum x_i^9 + 84 \sum x_i^6 x_j^3 + 1680 \sum_{i < j < k} x_i^3 x_j^3 x_k^3) - \\ - 15752880x_5^8 (4 \sum x_i^6 + 35 \sum_{i < j} x_i^3 x_j^3) \prod x_i - 1323241920\sqrt{2}x_5^7 (\sum x_i^3) \prod x_i^2 - \\ - 18564x_5^6 (\sum x_i^{12} + 220 \sum x_i^9 x_j^3 + 924 \sum_{i < j} x_i^6 x_j^6 + 18480 \sum_{j < k} x_i^6 x_j^3 x_k^3 + 369600 \prod x_i^3) - \\ - 3675672\sqrt{2}x_5^5 (2 \sum x_i^9 + 60 \sum x_i^6 x_j^3 + 525 \sum_{i < j < k} x_i^3 x_j^3 x_k^3) \prod x_i - 82702620x_5^4 (5 \sum x_i^6 + \\ + 28 \sum_{i < j} x_i^3 x_j^3) \prod x_i^2 - 204\sqrt{2}x_5^3 (\sum x_i^{15} + 455 \sum x_i^{12} x_j^3 + 5005 \sum x_i^9 x_j^6 + 100100 \sum_{j < k} x_i^9 x_j^3 x_k^3 + \\ + 420420 \sum_{j < k} x_i^6 x_j^6 x_k^3 + 8408400 (\sum x_i^3) \prod x_i^3) - 90x_5^2 (1428 \sum x_i^{12} + 102102 \sum x_i^9 x_j^3 + \\ + 350064 \sum_{i < j} x_i^6 x_j^6 + 3063060 \sum_{j < k} x_i^6 x_j^3 x_k^3) \prod x_i - 2412159750x_5^2 \prod x_i^4 - \\ - 250614\sqrt{2}x_5 (10 \sum x_i^9 + 165 \sum x_i^6 x_j^3 + 924 \sum_{i < j < k} x_i^3 x_j^3 x_k^3) \prod x_i^2;$$

индексы $i, j, k = \overline{1, 4}$ различны в каждом члене каждой суммы и удовлетворяют неравенствам, указанным под знаком суммы.

Используем эту систему базисных инвариантов для построения канонической системы $\{f_1, f_2, f_3, f_4, f_5\}$ базисных инвариантов группы $W(K_5)$.

Пусть $f_1 = I_4 = J_4$. Так как $\tilde{I}_6 = a_1 J_6$, то соотношение (1) запишем в виде: $\bar{f}_1(\partial)J_6 = 0$. Оно выполняется тождественно, поэтому, с точностью до постоянного множителя, $f_2 = J_6$.

Совокупность всех базисных инвариантов десятой степени группы $W(K_5)$ можно записать в виде

$$\tilde{I}_{10} = a_1 J_{10} + a_2 J_4 J_6,$$

где a_1, a_2 – неопределённые коэффициенты.

Соотношение (1), которое имеет вид

$$\bar{f}_1(\partial)I_{10} = 0, \bar{f}_2(\partial)I_{10} = 0,$$

приводит к уравнению $4a_1 + 177a_2 = 0$ для неопределённых коэффициентов a_1, a_2 .

Следовательно, $a_1 = 177c, a_2 = -4c$, и, с точностью до постоянного множителя, форма $f_3 = \hat{I}_{10}$ имеет вид

$$\begin{aligned} f_3 = & 18(17 \sum x_i^6 + 7 \sum_{i < j} x_i^3 x_j^3) \prod x_i + 4x_5^{10} + 12\sqrt{2}x_5^7 \sum x_i^3 - 1008x_5^6 \prod x_i - \\ & - 84x_5^4 (\sum x_i^6 - 7 \sum_{i < j} x_i^3 x_j^3) - 126\sqrt{2}x_5^3 (\sum x_i^3) \prod x_i + 1134x_5^2 \prod x_i^2 + \\ & + \sqrt{2}x_5 (8 \sum x_i^9 + 105 \sum x_i^6 x_j^3 - 1302 \sum_{i < j < k} x_i^3 x_j^3 x_k^3). \end{aligned} \quad (4)$$

Далее, семейство всех базисных инвариантов двенадцатой степени группы $W(K_5)$ запишем в виде

$$\tilde{I}_{12} = a_1 J_{12} + a_2 J_6^2 + a_3 J_4^3.$$

При этом форма I_{12} принадлежит искомой канонической системе базисных инвариантов, если удовлетворяет следующей системе дифференциальных уравнений:

$$\bar{f}_1(\partial)I_{12} = 0, \bar{f}_2(\partial)I_{12} = 0, \bar{f}_3(\partial)I_{12} = 0.$$

Третье уравнение выполняется тождественно, а первые два приводят к линейной системе 12 уравнений относительно трёх неопределённых коэффициентов. Её общее решение:

$$a_1 = -1487c, a_2 = 224532c, a_3 = -69300c.$$

Следовательно, f_4 (форма $\hat{I}_{12}$), с точностью до постоянного множителя, имеет вид

$$\begin{aligned} f_4 = & 505 \sum x_i^{12} + 7744 \sum x_i^9 x_j^3 - 19866 \sum_{i < j} x_i^6 x_j^6 + 126588 \sum_{j < k} x_i^6 x_j^3 x_k^3 - \\ & - 462000 \prod x_i^3 + 496x_5^{12} + 5104\sqrt{2}x_5^9 \sum x_i^3 - 123552x_5^8 \prod x_i + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +1848x_5^6(13\sum x_i^6 - 64\sum_{i<j} x_i^3 x_j^3) - 133056\sqrt{2}x_5^5(\sum x_i^3)\prod x_i - \\
& -249480x_5^4\prod x_i^2 - 22\sqrt{2}x_5^3(223\sum x_i^9 - 1680\sum x_i^6 x_j^3 + 34440\sum_{i<j<k} x_i^3 x_j^3 x_k^3) - \\
& -1188x_5^2(304\sum x_i^6 - 175\sum_{i<j} x_i^3 x_j^3)\prod x_i - 474012\sqrt{2}x_5(\sum x_i^3)\prod x_i^2.
\end{aligned} \tag{5}$$

Множество всех базисных инвариантов группы $W(K_5)$ восемнадцатой степени запишем так:

$$\tilde{I}_{18} = a_1 J_{18} + a_2 J_6^3 + a_3 J_4^3 J_6 + a_4 J_6 J_{12} + a_5 J_{10} J_4^2.$$

Тогда I_{18} принадлежит искомой канонической системе базисных инвариантов, если, согласно (1), удовлетворяет следующей системе дифференциальных уравнений:

$$\bar{f}_1(\partial)I_{18} = 0, \bar{f}_2(\partial)I_{18} = 0, \bar{f}_3(\partial)I_{18} = 0, \bar{f}_4(\partial)I_{18} = 0.$$

Она приводит к линейной системе 53 уравнений относительно пяти неопределённых коэффициентов $a_l, l = \overline{1,5}$. Её общее решение:

$$\begin{aligned}
a_1 &= -1465797839c, a_2 = 10312822362843c, a_3 = -6931667257515c, \\
a_4 &= -150080820435c, a_5 = 193212438408990c.
\end{aligned}$$

Следовательно, форму $f_5 = \hat{I}_{18}$, с точностью до постоянного множителя, можно записать так:

$$\begin{aligned}
f_5 &= 588128\sum x_i^{18} + 28757676\sum x_i^{15}x_j^3 + 275308761\sum x_i^{12}x_j^6 - 168006410\sum_{i<j} x_i^9x_j^9 - \\
& -1993448730\sum_{j<k} x_i^{12}x_j^3x_k^3 + 649879230\sum x_i^9x_j^6x_k^3 - 10817196390\sum_{i<j<k} x_i^6x_j^6x_k^6 - \\
& -2042040(3355\sum x_i^6 - 6321\sum_{i<j} x_i^3x_j^3)\prod x_i^3 - 267584x_5^{18} - 9142464\sqrt{2}x_5^{15}\sum x_i^3 + \\
& +540518400x_5^{14}\prod x_i - 297024x_5^{12}(331\sum x_i^6 - 670\sum_{i<j} x_i^3x_j^3) + \\
& +2131889760\sqrt{2}x_5^{11}(\sum x_i^3)\prod x_i - 20730790080x_5^{10}\prod x_i^2 - \\
& -388960\sqrt{2}x_5^9(242\sum x_i^9 - 5187\sum x_i^6x_j^3 + 100380\sum_{i<j<k} x_i^3x_j^3x_k^3) + \\
& +78764400x_5^8(116\sum x_i^6 - 119\sum_{i<j} x_i^3x_j^3)\prod x_i + 6285399120\sqrt{2}x_5^7(\sum x_i^3)\prod x_i^2 + \\
& +37128x_5^6(740\sum x_i^{12} - 37675\sum x_i^9x_j^3 + 234696\sum_{i<j} x_i^6x_j^6 - 919380\sum_{j<k} x_i^6x_j^3x_k^3 + \\
& +4065600\prod x_i^3) + 1837836\sqrt{2}x_5^5(1894\sum x_i^9 - 11220\sum x_i^6x_j^3 - \\
& -13125\sum_{i<j<k} x_i^3x_j^3x_k^3)\prod x_i + 1654052400x_5^4(4\sum x_i^6 - 91\sum_{i<j} x_i^3x_j^3)\prod x_i^2 -
\end{aligned} \tag{6}$$

$$\begin{aligned}
& -102\sqrt{2}x_5^3(36208\sum x_i^{15} + 2211755\sum x_i^{12}x_j^3 - 26751725\sum x_i^9x_j^6 + \\
& + 158208050\sum_{j < k} x_i^9x_j^3x_k^3 - 254984730\sum_{i < j} x_i^6x_j^6x_k^3 + 1030029000(\sum x_i^3)\prod x_i^3) - \\
& -9180x_5^2(125419\sum x_i^{12} + 332332\sum x_i^9x_j^3 - 6227364\sum_{i < j} x_i^6x_j^6 + \\
& + 1456455\sum_{j < k} x_i^6x_j^3x_k^3)\prod x_i - 214682217750x_5^2\prod x_i^4 - \\
& -2756754\sqrt{2}x_5(3160\sum x_i^9 - 7395\sum x_i^6x_j^3 + 6216\sum_{i < j < k} x_i^3x_j^3x_k^3)\prod x_i^2.
\end{aligned}$$

Таким образом, каноническая система базисных инвариантов для группы $W(K_5)$ состоит из форм (2) – (6).

Заключение

В статье построена в явном виде каноническая система базисных инвариантов для унитарной группы $W(K_5)$, порождённой отражениями в пространстве U^5 . Таким образом, с учётом результатов, полученных автором ранее, завершена работа по построению в явном виде канонических систем базисных инвариантов всех не-вещественных примитивных групп G пространств U^n для $n \leq 5$.

Отметим, что среди конечных примитивных не-вещественных групп G осталась не рассмотренной единственная группа – группа Митчелла $W(K_6)$ порядка $108 \cdot 9!$, порождённая в пространстве U^6 отражениями второго порядка относительно 126 5-мерных плоскостей; степени $m_i = 6, 12, 18, 24, 30, 42$ [1]. Система базисных инвариантов группы $W(K_6)$ в явном виде приведена автором в работе [13]. Методом, используемым в данной статье, автором построены в явном виде базисные инварианты канонической системы группы $W(K_6)$ степеней 6, 12 и 18. Задача построения в явном виде оставшихся базисных инвариантов канонической системы этой группы пока не решена, что обусловлено трудностями вычислительного характера.

ЛИТЕРАТУРА

1. Shephard G.C., Todd J.A. Finite unitary reflection groups // Can. J. Math. 1954. V. 6. No. 2. P. 274–304. DOI: 10.4135/CJM-1954-028-3.
2. Flatto L. Basic sets of invariants for finite reflection groups // Bull. Amer. Math. Soc. 1968. V. 74. P. 730–734. DOI: 10.1090/S0002-9904-1968-12017-8.
3. Iwasaki K. Basic invariants of finite reflection groups // J. Algebra. 1997. V. 195. No. 2. P. 538–547. DOI: 10.1006/jabr.1997.7066.
4. Nakashima N., Terano H., Tsujie S. Canonical systems of basic invariants for unitary reflection groups // Canad. Math. Bull. 2016. V. 59. No. 3. P. 617–623. DOI: 10.4153/CMB-2016-031-7.
5. Tsujie S. Construction of canonical systems of basic invariants for finite reflection groups. The thesis (doctoral). Hokkaido. 2014. 40 p. DOI: 10.14943/doctoral.k11536.
6. Рудницкий О.И. Канонические системы базисных инвариантов для групп симметрий многогранников Гессе // Таврический вестник информатики и математики. 2017. № 3 (36). С. 73–78.
7. Рудницкий О.И. Канонические системы базисных инвариантов для унитарных групп $W(J_3(m))$, $m = 4, 5$ // Таврический вестник информатики и математики. 2018. № 1 (38). С. 89–96.

8. Рудницкий О.И., Бочко А.Ю., Рольская Е.Н. Канонические системы базисных инвариантов для примитивных групп, порождённых отражениями, на унитарной плоскости // Математика, информатика, компьютерные науки, моделирование, образование: сб. научных трудов МИКМО-2018. Симферополь. 2018. С. 59–71.
9. Рудницкий О.И. Канонические системы базисных инвариантов конечных примитивных групп отражений четырёхмерного унитарного пространства // Динамические системы. 2019. Т. 9(37). № 1.
10. Talamini V. Canonical bases of invariant polynomials for the irreducible reflection groups of types E_6 , E_7 and E_8 // J. Algebra. 2018. V. 503. P. 590–603. DOI: 10.1016/j.jalgebra.2018.01.017.
11. Рудницкий О.И. Алгебраические поверхности с конечными группами симметрий в унитарном пространстве: дис. ... канд. физ.-мат. наук. Минск, 1990. 115 с.
12. Rudnitskii O.I. Some properties of the basis invariants of the unitary group $W(K_5)$ // Journal of Mathematical Sciences. 1990. 51. No. 5. P. 2570–2574. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01104176>.
13. Rudnitskii O.I. Basis invariants of the Mitchell group generated by reflections in six-dimensional unitary space // J. Soviet Mathematics. 1990. V. 65. No. 1. P. 1479–1482. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01105303>.

Статья поступила 04.12.2018 г.

Rudnitskii O.I. (2019) CANONICAL SYSTEM OF BASIC INVARIANTS FOR UNITARY GROUP $W(K_5)$. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 58. pp. 32–40

DOI 10.17223/19988621/58/3

Keywords: Unitary space, reflection, reflection groups, algebra of invariants, basic invariant, canonical system of basic invariants.

For a finite group G generated by reflections in the n -dimensional unitary space U^n , the algebra I^G of all G -invariant polynomials $f(x_1, \dots, x_n)$ is generated by n algebraically independent homogeneous polynomials $f_i \in I^G$ with $\deg f_i = m_i$ ($i = \overline{1, n}$); $m_1 \leq m_2 \leq \dots \leq m_n$ (Shephard G.C., Todd J.A.).

According to Nakashima N., Terao H., and Tsujie S., system $\{f_1, \dots, f_n\}$ of basic invariants of the group G is said to be canonical if it satisfies the following system of partial differential equations:

$$\overline{f_i}(\partial)f_j = 0, i, j = \overline{1, n} \ (i < j),$$

where the differential operator $\overline{f_i}(\partial)$ is obtained from polynomial f_i if each its coefficient is replaced by the complex conjugate and each variable x_k is replaced by $\frac{\partial}{\partial x_k}$.

In the previous works, the author obtained in an explicit form canonical systems of basic invariants for all finite primitive unitary groups G generated by reflections in unitary spaces of dimensional 2, 3, and 4.

In this paper, canonical systems of basic invariants were constructed in an explicit form for unitary groups $W(K_5)$ generated by reflections in space U^5 .

AMS Mathematical Subject Classification: 51F15; 14L24

RUDNITSKII Oleg Ivanovich (Candidate of Physics and Mathematics, Vernadsky Crimean Federal University, Simferopol, Russian Federation). E-mail: oirud58@gmail.com

REFERENCES

1. Shephard G.C., Todd J.A. (1954) Finite unitary reflection groups. *Can. J. Math.* 6(2). pp. 274–304. DOI: 10.4135/CJM-1954-028-3
2. Flatto L. (1968) Basic sets of invariants for finite reflection groups. *Bull. Amer. Math. Soc.* 74. pp. 730–734. DOI: 10.1090/S0002-9904-1968-12017-8.
3. Iwasaki K. (1997) Basic invariants of finite reflection groups. *J. Algebra.* 195(2). pp. 538–547. DOI: 10.1006/jabr.1997.7066.
4. Nakashima N., Terao H., Tsujie S. (2016) Canonical systems of basic invariants for unitary reflection groups. *Canad. Math. Bull.* 59(3). pp. 617–623. DOI: 10.4153/CMB-2016-031-7.
5. Tsujie S. (2014) *Construction of canonical systems of basic invariants for finite reflection groups. The thesis (doctoral)*. Hokkaido. 40 p. DOI: 10.14943/doctoral.k11536.
6. Rudnitskii O.I. (2017) Kanonicheskie sistemy bazisnykh invariantov dlya grupp simmetrii mnogogrannikov Gesse [Canonical systems of basic invariants for symmetry groups of Hessian polyhedrons] // *Taurida Journal of Computer Science Theory and Mathematics.* 3(36). pp. 73–78.
7. Rudnitskii O.I. (2018) Kanonicheskie sistemy bazisnykh invariantov dlya unitarnykh grupp $W(J_3(m))$, $m = 4, 5$ [Canonical systems of basic invariants for unitary groups $W(J_3(m))$, $m = 4, 5$]. *Taurida Journal of Computer Science Theory and Mathematics.* 1(38). pp. 89–96.
8. Rudnitskii O.I., Bochko A. Yu., Rolskaya E. N. (2018) Kanonicheskie sistemy bazisnykh invariantov dlya primitivnykh grupp, porozhdennykh otrazheniyami, na unitarnoy ploskosti [Canonical systems of basic invariants for primitive groups generated by reflections on the unitary plane] // *Mathematics, informatics, computer science, modeling, education: Collection of papers MICMO-2018*. Simferopol. P. 59–71.
9. Rudnitskii O.I. (2019) Kanonicheskie sistemy bazisnykh invariantov konechnykh primitivnykh grupp otrazheniy chetyrekhmernogo unitarnogo prostranstva [Canonical system of basic invariants for finite primitive reflection groups of four-dimensional unitary space] // *Dinamicheskie Sistemy – Dynamical Systems.* 37(1).
10. Talamini V. (2018) Canonical bases of invariant polynomials for the irreducible reflection groups of types E_6 , E_7 and E_8 . *Journal of Algebra.* 503. pp. 590–603. DOI: 10.1016/j.jalgebra.2018.01.017.
11. Rudnitskii O.I. (1990) *Algebraicheskie poverkhnosti s konechnymi gruppami simmetrii v unitarnom prostranstve* [Algebraic surfaces with finite symmetry groups in unitary space]. Thesis for the degree of Candidate of Physico-Mathematical Sciences. Minsk. 115 p.
12. Rudnitskii O.I. (1990) Some properties of the basis invariants of the unitary group $W(K_5)$. *Journal of Mathematical Sciences.* 51(5). pp. 2570–2574. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01104176>.
13. Rudnitskii O.I. (1990) Basis invariants of the Mitchell group generated by reflections in six-dimensional unitary space. *Journal of Soviet Mathematics.* 65(1). pp. 1479–1482. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01105303>.

Received: December 4, 2018

УДК 514.76
DOI 10.17223/19988621/58/4

MSC 53C15, 53C30, 53C25, 22E25

Н.К. Смоленцев

ЛЕВОИНВАРИАНТНЫЕ ПОЧТИ ПАРА-ЭРМИТОВЫ СТРУКТУРЫ НА НЕКОТОРЫХ ШЕСТИМЕРНЫХ НИЛЬПОТЕНТНЫХ ГРУППАХ ЛИ

Из 34 классов шестимерных нильпотентных групп Ли имеется пять групп, на которых не существует ни симплектических, ни комплексных структур. В данной работе на таких группах Ли G естественным образом определены почти комплексные и почти пара-комплексные структуры и соответствующие метрики, которые оказались полуплоскими псевдоримановыми.

Ключевые слова: нильмногообразия, шестимерные нильпотентные алгебры Ли, левоинвариантные пара-комплексные структуры, эйнштейновы многообразия, полуплоские структуры.

1. Введение

Левоинвариантная кэлерова структура на группе Ли G – это тройка (g, ω, J) , состоящая из левоинвариантной римановой метрики g , левоинвариантной симплектической формы ω и ортогональной левоинвариантной комплексной структуры J , причем $g(X, Y) = \omega(X, JY)$ для любых левоинвариантных векторных полей X и Y на G . Поэтому такую структуру на группе G можно задать парой (ω, J) , где ω – симплектическая форма, а J – комплексная структура, согласованная с ω , т.е. такая, что $\omega(JX, JY) = \omega(X, Y)$. Если $\omega(X, JX) > 0, \forall X \neq 0$, то получается кэлерова метрика, а если условие положительности не выполняется, то $g(X, Y) = \omega(X, JY)$ является псевдоримановой метрикой и тогда (g, ω, J) называется псевдокэлеровой структурой на группе Ли G . Классификация вещественных 6-мерных нильпотентных алгебр Ли, допускающих инвариантные комплексные структуры, получена в работе [1]. Показано, что только 18 классов допускают левоинвариантные комплексные структуры. Авторами [2] получена классификация симплектических структур на 6-мерных нильпотентных алгебрах Ли. Из 34 классов изоморфных связных односвязных шестимерных нильпотентных групп Ли только 26 классов допускают левоинвариантные симплектические структуры. Условие существования левоинвариантной положительно определенной кэлеровой метрики на группе Ли G накладывает серьезные ограничения на структуру ее алгебры Ли $\mathfrak{g}$. Например, в работе [3] показано, что такая алгебра Ли не может быть нильпотентной за исключением абелевого случая. Хотя нильпотентные группы Ли и нильмногообразия (за исключением тора) не допускают левоинвариантных кэлеровых метрик, но на таких многообразиях могут существовать левоинвариантные псевдоримановы кэлеровы метрики. В работе [4] показано, что 14 классов симплектических шестимерных нильпотентных групп Ли допускают согласованные комплексные структуры и, поэтому, определяют псевдокэлеровы метрики. Более полное исследование свойств кривизны таких псевдокэлеровых и почти псевдокэлеровых структур приведено в работах [5, 6].

Как уже упоминалось, 26 из 34 классов шестимерных нильпотентных групп Ли допускают левоинвариантные симплектические структуры. Из оставшихся восьми классов несимплектических групп Ли, пять групп Ли G^i не допускают также и комплексных структур, Их алгебры Ли $\mathfrak{g}_i$ приведены ниже:

$$\mathfrak{g}_1: (0, 0, 0, 0, 12, 15+34).$$

$$\mathfrak{g}_2: (0, 0, 0, 12, 23, 14+35),$$

$$\mathfrak{g}_3: (0, 0, 0, 12, 13, 14+35),$$

$$\mathfrak{g}_4: (0, 0, 12, 13, 14, 34-25),$$

$$\mathfrak{g}_5: (0, 0, 12, 13, 14+23, 34-25).$$

Здесь используется задание алгебры Ли $\mathfrak{g}$ в виде m -ки чисел ij , основанной на последовательности дифференциалов $(0, 0, de^3, \dots, de^m)$ базисных 1-форм, в которой используется сокращенная запись $e^{ij} = e^i \wedge e^j$ как ij . Например, запись $(0, 0, 0, 0, 12, 34)$ обозначает алгебру Ли со структурными уравнениями:

$$de^1 = de^2 = de^3 = 0, \quad de^4 = 0, \quad de^5 = e^1 \wedge e^2 \quad \text{и} \quad de^6 = e^3 \wedge e^4.$$

В данной работе изучаются именно эти группы Ли. Целью работы является определение на рассматриваемых группах Ли новых левоинвариантных геометрических структур, компенсирующих, в некотором смысле, отсутствие симплектических и комплексных структур. На всех таких группах Ли G^i любая левоинвариантная замкнутая 2-форма ω является вырожденной. Предложены естественные способы ослабить требование замкнутости для сохранения невырожденности ω , причем так, что 3-форма $d\omega$ также является невырожденной и выполняется свойство $d\omega^2 = \omega \wedge d\omega = 0$. В результате мы получаем совместимую [7] пару (ω, ρ) , где в качестве 3-формы ρ выступает $d\omega$, которая определяет полуплоскую структуру. Мы приводим явный вид соответствующих псевдо почти эрмитовых полуплоских и почти пара-псевдоэрмитовых полуплоских структур. Псевдориманова метрика является эйнштейновой. Показано, что на всех рассматриваемых группах Ли полуплоская структура рассматриваемого типа $(\omega, d\omega)$ не определяет псевдориманову метрику на $G^i \times I$ с группой голономии из особой некомпактной группы G_2^* . Данная работа является продолжением статьи [8].

Для любой нильпотентной группы Ли G с рациональными структурными константами существует дискретная подгруппа Γ , такая, что $M = \Gamma \backslash G$ – компактное многообразие, называемое нильмногообразием. Поэтому все результаты имеют место и для соответствующих шестимерных компактных нильмногообразий.

2. Предварительные сведения

Пусть G – вещественная нильпотентная группа Ли и $\mathfrak{g}$ – ее алгебра Ли. Нильпотентные группы Ли интересны тем, что из них можно образовать компактные нильмногообразия вида $\Gamma \backslash G$, где G – связная и односвязная нильпотентная группа Ли, а Γ – кокомпактная дискретная подгруппа. При этом когомологии де Рама изоморфны когомологиям алгебры Ли $\mathfrak{g}$: $H_{dR}^p(\Gamma \backslash G) \cong H^p(\mathfrak{g})$, $p \geq 0$. Кроме того, на нильпотентных группах Ли (и нильмногообразиях) не существует левоинвариантных положительно определенных кэлеровых метрик [3]. Однако могут существовать левоинвариантные псевдоримановы кэлеровы метрики [4].

2.1. Левинвариантные геометрические структуры

Левинвариантная почти комплексная структура на группе Ли G есть левинвариантное поле эндоморфизмов $J: TG \rightarrow TG$ касательного расслоения TG , обладающее свойством $J^2 = -Id$. Поскольку J определяется линейным оператором J на алгебре Ли $\mathfrak{g} = T_e G$, то для простоты мы будем говорить, что J – это инвариантная почти комплексная структура на алгебре Ли $\mathfrak{g}$. Для того чтобы почти комплексная структура J определяла комплексную структуру на группе Ли G , необходимо и достаточно (по теореме Ньюлендера – Ниренберга, [9]) обращения в нуль тензора Нейенхейса:

$$[JX, JY] - [X, Y] - J[JX, Y] - J[X, JY] = 0, \text{ для любых } X, Y \in \mathfrak{g}.$$

Левинвариантная симплектическая структура на группе Ли G – это левинвариантная замкнутая невырожденная 2-форма ω . Она задается 2-формой ω максимального ранга на алгебре Ли $\mathfrak{g}$. Замкнутость формы эквивалентна условию

$$\omega([X, Y], Z) - \omega([X, Z], Y) + \omega([Y, Z], X) = 0, \forall X, Y, Z \in \mathfrak{g}.$$

В этом случае алгебру Ли $\mathfrak{g}$ и группу Ли G будем называть просто симплектическими.

Левинвариантная кэлера структура на группе Ли G – это тройка (g, J, ω) , состоящая из левинвариантной римановой метрики g , ортогональной левинвариантной комплексной структуры J и левинвариантной симплектической формы, причем $\omega(X, Y) = g(JX, Y)$, $\forall X, Y \in \mathfrak{g}$. Такую структуру на группе Ли G можно задать парой (ω, J) , где ω – симплектическая форма, а J – комплексная структура, согласованная с ω , т.е. такая, что $\omega(JX, JY) = \omega(X, Y)$, $\forall X, Y \in \mathfrak{g}$. Если $\omega(X, JY) > 0$, $\forall X \neq 0$, то получается кэлера метрика $g(X, Y) = \omega(X, JY)$, а если условие положительности не выполняется, то $g(X, Y)$ является псевдоримановой метрикой и тогда (g, J, ω) называется псевдокэлеровой структурой на группе Ли G .

2.2. Конструкция Хитчина

Если 2-форма ω незамкнута, то можно рассматривать 3-форму $d\omega$. В работе [10] Хитчин определил понятие *невырожденности* (стабильности) для 3-форм ρ и построил линейный оператор K_ρ , квадрат которого пропорционален тождественному оператору Id . Напомним его основные конструкции.

Пусть V – 6-мерное вещественное векторное пространство, μ – форма объема на V и $\Lambda^3 V^*$ – 20-мерное линейное пространство кососимметрических полилинейных 3-форм на V . Для 3-формы $\rho \in \Lambda^3 V^*$ и вектора $X \in V$ возьмем внутреннее произведение $i_X \rho \in \Lambda^2 V^*$. Тогда $i_X \rho \wedge \rho \in \Lambda^5 V^*$. Естественное спаривание внешним произведением $V^* \otimes \Lambda^5 V^* \rightarrow \Lambda^6 V^* \cong \mathbf{R}\mu$ определяет изоморфизм $A: \Lambda^3 V^* \cong V$, и, используя это, мы определяем линейное преобразование $K_\rho: V \rightarrow V$ как

$$K_\rho(X) = A(i_X \rho \wedge \rho).$$

Другими словами, $i_{K_\rho(X)} \mu = i_X \rho \wedge \rho$.

Определим $\lambda(\rho) \in \mathbf{R}$ через след квадрата K_ρ , $\lambda(\rho) = \text{tr } K_\rho^2 / 6$. Форма ρ называется *невырожденной* (или стабильной), если $\lambda(\rho) \neq 0$. В работе [10] показано, что если $\lambda(\rho) \neq 0$, тогда

- $\lambda(\rho) > 0$ тогда и только тогда, когда $\rho = \alpha + \beta$, где α, β – вещественные разложимые 3-формы и $\alpha \wedge \beta \neq 0$;
- $\lambda(\rho) < 0$ тогда и только тогда, когда $\rho = \alpha + \bar{\alpha}$, где $\alpha \in \Lambda^3(V^* \otimes \mathbf{C})$ есть комплексная разложимая 3-форма и $\alpha \wedge \bar{\alpha} \neq 0$.

Линейное преобразование K_ρ обладает следующими свойствами: $\text{tr } K_\rho = 0$ и $K_\rho^2 = \lambda(\rho)Id$. В случае $\lambda(\rho) < 0$ вещественная 3-форма ρ определяет структуру J_ρ комплексного векторного пространства на векторном пространстве V следующим образом:

$$J_\rho = \frac{1}{\sqrt{-\lambda(\rho)}} K_\rho,$$

а если $\lambda(\rho) > 0$, то 3-форма ρ определяет пара-комплексную структуру J_ρ , т.е., $J_\rho^2 = 1$, $J_\rho \neq 1$ на векторном пространстве V по аналогичной формуле:

$$J_\rho = \frac{1}{\sqrt{\lambda(\rho)}} K_\rho.$$

Напомним, что структура почти произведения называется *паракомплексной*, если собственные подпространства имеют одинаковую размерность.

Элементы $GL(V)$ -орбиты 3-формы ρ , соответствующие $\lambda(\rho) > 0$, имеют стабилизатор $SL(3, \mathbf{R}) \times SL(3, \mathbf{R})$ в $GL^+(V)$. Элементы орбиты, соответствующей $\lambda(\rho) < 0$ имеют стабилизатор $SL(3, \mathbf{C})$ в $GL^+(V)$.

В обоих случаях для формы ρ определяется дуальная форма $\hat{\rho}$ формулой $\rho^\wedge = J_\rho^* \rho$. Если $\lambda(\rho) > 0$ и $\rho = \alpha + \beta$, то $\rho^\wedge = \alpha - \beta$, а если $\lambda(\rho) < 0$ и $\rho = \alpha + \bar{\alpha}$, то $\rho^\wedge = i(\bar{\alpha} - \alpha)$.

2.3. Специальные почти ε -эрмитовы структуры

Пусть $\varepsilon = 1$ или $\varepsilon = -1$ и i_ε – символ, удовлетворяющий условию $i_\varepsilon^2 = \varepsilon$. Определим ε -комплексные числа как $\mathbf{C}_\varepsilon = \mathbf{R}[i_\varepsilon]$. Мы будем использовать термин пара-комплексные числа для вещественной алгебры $\mathbf{C}_1 = \mathbf{R} \oplus \mathbf{R}$. ε -комплексная структура J на векторном пространстве V размерности $n = 2m$ определяется как эндоморфизм, который удовлетворяет условию $J^2 = \varepsilon Id$ и $\dim V^+ = \dim V^- = m$ для $\varepsilon = 1$. Пара (V, J) называется ε -комплексным векторным пространством. Стабилизатор ε -комплексной структуры J в $GL(V)$ называется ε -комплексной общей линейной группой $GL(V, J)$. В пара-комплексном случае $V = V^+ \oplus V^-$ и стабилизатор J есть пара-комплексная линейная группа $GL(V, J) \cong GL(V^+) \oplus GL(V^-) \cong GL(m, \mathbf{R}) \oplus GL(m, \mathbf{R})$. Подробнее о специальных ε -эрмитовых структурах см. в [7]

ε -эрмитова структура на векторном пространстве V есть пара (g, J) , которая состоит из (псевдо)римановой метрики и эндоморфизма J , удовлетворяющего $J^2 = \varepsilon Id$, $J^* g = -\varepsilon g$. Невырожденная 2-форма $\omega(X, Y) = g(X, JY)$ называется фундаментальной 2-формой.

Определение 1. Специальная ε -эрмитова структура $(g, J, \omega, \rho, \Psi)$ на V есть ε -эрмитова структура (g, J, ω) вместе с ε -комплексной формой объема $\Psi = \rho + i_\varepsilon \hat{\rho}$, где $\hat{\rho} = J^* \rho$.

Почти ε -комплексное многообразие представляет собой многообразие M размерности $n = 2m$, наделенное почти ε -комплексной структурой, которая определяется как почти комплексная структура, если $\varepsilon = -1$, и почти пара-комплексная структура, если $\varepsilon = 1$. Почти пара-комплексная структура на $2n$ -мерном многообразии M определяется полем J эндоморфизмов касательного расслоения TM , таких, что $J^2 = Id$, причем ранги собственных распределений $T^\pm M := \ker(Id \mp J)$ равны. Почти пара-комплексная структура J называется *интегрируемой*, если распре-

деления $T^{\pm}M$ инволютивны. В этом случае J называется пара-комплексной структурой. Тензор Нийенхейса N_J определяется равенством

$$N_J(X, Y) = [X, Y] + [JX, JY] - J[JX, Y] - J[X, JY]$$

для всех векторных полей X, Y на M . Как и в комплексном случае, пара-комплексная структура J интегрируема тогда и только тогда, когда $N_J = 0$.

Почти ε -эрмитово многообразие есть многообразие M размерности $n = 2m$, наделенное почти ε -эрмитовой структурой (g, J) , которая состоит из (псевдо)римановой метрики и поля эндоморфизмов J , удовлетворяющего $J^2 = \varepsilon Id$, $J^*g = -\varepsilon g$. Невырожденная 2-форма $\omega(X, Y) = g(X, JY)$ называется фундаментальной 2-формой.

Таким образом, почти пара-эрмитова структура состоит из нейтральной метрики и анти-ортогональной почти пара-комплексной структуры, $g(JX, JY) = -g(X, Y)$. Если (g, J) – пара-кэлерава структура на M , то $\omega = g \circ J$ является симплектической структурой. В работе [11] представлен обзор теории и подробно рассмотрены инвариантные пара-комплексные и пара-кэлеровы структуры на группах Ли.

Определение 2. Пара невырожденных форм $(\omega, \rho) \in \Lambda^2(V^*) \times \Lambda^3(V^*)$ называется согласованной, если $\omega \wedge \rho = 0$, и нормализованной, если $\rho \wedge \rho = 2\omega^3/3$.

Каждая совместимая пара (ω, ρ) единственным образом определяет ε -комплексную структуру J_ρ (т.е., $J_\rho^2 = \varepsilon$), такую, что $\omega(X, J_\rho Y) = -\omega(J_\rho X, Y)$, а также скалярное произведение $g_{(\omega, \rho)}(X, Y) = \varepsilon \omega(X, J_\rho Y)$ (сигнатуры (3,3) для $\varepsilon = 1$ и сигнатуры (2,4) или (4,2) для $\varepsilon = -1$), и ε -комплексную форму объема $\Psi = \rho + i_\varepsilon \rho \wedge$ типа (3,0) относительно J_ρ (где i_ε есть комплексная или пара-комплексная мнимая единица). Кроме того, стабилизатор пары (ω, ρ) относительно $GL(V)$ есть $SU(p, q)$ для $\varepsilon = -1$ и $SL(3, \mathbf{R}) \subset SO(3, 3)$ для $\varepsilon = 1$. Поэтому пара (ω, ρ) для $\varepsilon = -1$ определяет специальную псевдо почти эрмитову структуру, а если $\varepsilon = 1$, то специальную почти пара-эрмитову структуру.

Определение 3. Специальное почти ε -эрмитово шестимерное многообразие (M, ω, ρ) называется полуплоским, если

$$d\rho = 0, d\omega^2 = 0.$$

Полуплоские $SU(3)$ -структуры впервые были рассмотрены в [12] как естественный класс, на основе которого может быть получена параллельная G_2 -структура при помощи потока Хитчина. Название «полуплоская» связано с тем, что это исключает 21 из всех 42 размерностей для внутреннего кручения структуры. Полуплоские $SU(3)$ -структуры на шестимерных нильпотентных группах Ли изучались в [13].

В работе [12] Хитчин ввел следующие эволюционные уравнения для зависящей от времени пары стабильных форм $(\omega(t), \rho(t))$ с начальной полуплоской $SU(3)$ -структурой $(\omega(0), \rho(0))$ (см. также [7]):

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = d\omega, \quad \frac{\partial}{\partial t} \omega^\wedge = d\rho^\wedge,$$

где $\omega^\wedge = \omega^2/2$ и $\rho^\wedge = J_\rho^* \rho$ и $\rho \wedge \rho = 2\omega^3/3$. Первое уравнение обеспечивает замкнутость 3-формы $\varphi = \omega \wedge dt + \rho$, а второе – замкнутость Ходж-дуальной формы $*\varphi$ на семимерном многообразии на $M \times I$, где I – некоторый интервал. Для компактного многообразия M Хитчин показал, что решение, определенное на некотором интервале I , задает риманову метрику на $M \times I$ с группой голономии из особой группы G_2 . В работе [7] этот результат был обобщен на специальные почти ε -эрмитовы полуплоские шестимерные и некомпактные многообразия (M, ω, ρ) . При этом, в случае, когда ε -эрмитова метрика g не является положительно опре-

деленной, решение указанной системы на некотором интервале I определяет псевдориманову метрику на $M \times I$ с группой голономии из G_2^* . Напомним, что гладкое семимногообразие допускает G_2 - или G_2^* -структуру тогда и только тогда, когда существует стабильная 3-форма φ . Эта структура параллельна тогда и только тогда, когда φ замкнута и козамкнута, т.е. $d\varphi = d^*\varphi = 0$, где $*$ обозначает оператор Ходжа относительно метрики, индуцированной G_2^* -структурой.

Замечание. В данной работе мы предполагаем, что внешнее произведение и внешний дифференциал определяются без нормирующего множителя. Тогда, в частности, $dx \wedge dy = dx \otimes dy - dy \otimes dx$ и $d\eta(X, Y) = X\eta(Y) - Y\eta(X) - \eta([X, Y])$. Пусть ∇ – связность Леви – Чивита, соответствующая (псевдо)римановой метрике g . Она определяется из шестичленной формулы [9], которая для левоинвариантных векторных полей X, Y, Z на группе Ли принимает вид $2g(\nabla_X Y, Z) = g([X, Y], Z) + g([Z, X], Y) + g(X, [Z, Y])$. Если $R(X, Y) = [\nabla_X, \nabla_Y] - \nabla_{[X, Y]}$ – тензор кривизны, то для (псевдо)римановой метрики g тензор Риччи $Ric(X, Y)$ определяется как свертка тензора кривизны по первому и по четвертому (верхнему) индексам.

3. Левоинвариантные почти ε -эрмитовы структуры

В этом разделе мы рассмотрим группы Ли, которые не допускают ни симплектических, ни комплексных левоинвариантных структур. Будет показано, что они допускают невырожденные левоинвариантные 2-формы, внешние дифференциалы которых также являются невырожденными. Кроме того, они допускают полу-плоские почти пара-комплексные структуры и эйнштейновы псевдоримановы метрики сигнатуры (3,3).

3.1. Группа Ли G^1

Коммутационные соотношения: $[e_1, e_2] = e_5$, $[e_1, e_5] = e_6$, $[e_3, e_4] = e_6$. Пусть $\omega = a_{ij}e^i \wedge e^j$ – произвольная 2-форма. Оператор Хитчина $K_{d\omega}$ для общей формы ω имеет достаточно сложный вид, при этом $K_{d\omega}^2 = a_{56}^4 Id$. Свойство $\omega \wedge d\omega = 0$ выполняется при условиях

$$a_{34}a_{56} + a_{35}a_{46} - a_{36}a_{45} = 0, a_{12}a_{56} - a_{15}a_{26} + a_{16}a_{25} - a_{23}a_{46} + a_{24}a_{36} - a_{26}a_{34} = 0.$$

Легко видеть, что форма ω является замкнутой только в том случае, когда

$$\omega = e^1 \wedge (a_{12}e^2 + a_{13}e^3 + a_{14}e^4 + a_{15}e^5) + e^2 \wedge (a_{23}e^3 + a_{24}e^4 + a_{25}e^5) + a_{34}e^3 \wedge e^4.$$

Такая форма ω является вырожденной. Условия замкнутости ω включают, в частности, равенство нулю коэффициента a_{56} , который определяет невырожденность $d\omega$. Поэтому мы ослабим условия замкнутости формы ω тем, что будем считать $a_{56} \neq 0$. Тогда обе формы ω и $d\omega$ являются невырожденными. Свойство $\omega \wedge d\omega = 0$ выполняется в этом случае при $a_{34} = 0$ и $a_{12} = 0$. Форма ω является невырожденной при условии $a_{56}(a_{13}a_{24} - a_{14}a_{23}) \neq 0$ и имеют место следующие выражения:

$$\omega = e^1 \wedge (a_{13}e^3 + a_{14}e^4 + a_{15}e^5) + e^2 \wedge (a_{23}e^3 + a_{24}e^4 + a_{25}e^5) + a_{56}e^5 \wedge e^6,$$

$$\rho = d\omega = -a_{56}e^{126} + a_{56}e^{345},$$

$$\omega^2/2 = (-a_{13}a_{24} + a_{14}a_{23})e^{1234} + (-a_{13}a_{25} + a_{15}a_{23})e^{1235} + (-a_{14}a_{25} + a_{15}a_{24})e^{1245} +$$

$$+ a_{13}a_{56}e^{1356} + a_{14}a_{56}e^{1456} + a_{23}a_{56}e^{2356} + a_{24}a_{56}e^{2456}.$$

$$\omega^3 = 6(-a_{13}a_{24}a_{56} + a_{14}a_{23}a_{56})e^{123456}.$$

$$\rho^\wedge = J^*(\rho) = -a_{56}e^{126} - a_{56}e^{345}, \quad \rho^\wedge \wedge \rho = 2a_{56}^2e^{123456}.$$

$$d\rho^\wedge = d(J^*(d\omega)) = 2a_{56}e^{1234}.$$

Пара (ω, ρ) при $\rho = d\omega$ определяет полуплоскую структуру. Условие нормализации $\hat{\rho} \wedge \rho = 2\omega^3/3$ выполняется, если $a_{56} = 2(-a_{13}a_{24} + a_{14}a_{23})$. Будем считать коэффициенты a_{ij} зависящими от времени t и рассмотрим уравнения Хитчина [7] для построения псевдоримановой метрики на $G \times I$ с группой голономии из G_2^* , определенной 3-формой $\varphi = \omega \wedge dt + d\omega$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = d\omega, \quad \frac{\partial}{\partial t} \hat{\omega} = d\hat{\rho},$$

где $\hat{\omega} = \omega^2/2$ и $\hat{\rho} = J_\rho^* \rho$. В нашем случае $\rho = d\omega$. Поэтому из первого уравнения мы получаем $a_{56} = ce^t$. Из второго уравнения получаем, в частности, что $a_{24}a_{56}$, $a_{23}a_{56}$, $a_{14}a_{56}$, $a_{13}a_{56}$ являются константами. Поэтому, с точностью до констант, $a_{13} = a_{24} = a_{23} = a_{14} = e^{-t}$. Получаем: $-a_{13}a_{24} + a_{14}a_{23} = ae^{-2t}$, что делает невозможным выполнение второго уравнения и условия нормализации.

Таким образом, для рассматриваемого класса структур (ω, ρ) не существует псевдоримановой метрики на $G \times I$ с группой голономии из G_2^* . В то же время, 3-форма $\varphi = \omega \wedge dt + d\omega$ на $G \times I$ является замкнутой, если $a_{56} = ce^t$.

Обратимся снова к оператору Хитчина. В нашем случае он имеет вид $K_{d\omega} = a_{56}^2 \text{diag}\{+1, +1, -1, -1, -1, +1\}$.

Оператор $J = K_{d\omega} / a_{56}^2$ задает почти пара-комплексную структуру, $J^2 = Id$, обладающую свойством $\omega(JX, JY) = -\omega(X, Y)$. Псевдориманова метрика $g(X, Y) = \omega(X, JY)$ сигнатуры (3,3) имеет вид

$$g = -2e^1(a_{13}e^3 + a_{14}e^4 + a_{15}e^5) - 2e^2(a_{23}e^3 + a_{24}e^4 + a_{25}e^5) + 2a_{56}e^4e^6.$$

Прямые вычисления в системе Maple показывают, что при $a_{15} = a_{25} = 0$ данная метрика имеет диагональный оператор Риччи с двумя собственными значениями

$$RIC(g) = \frac{a_{56}}{2(a_{13}a_{24} - a_{14}a_{23})} \text{diag}\{-1, -1, -1, -1, +1, +1\},$$

ее скалярная кривизна задается формулой

$$R = -\frac{a_{56}}{a_{13}a_{24} - a_{14}a_{23}}.$$

3.2. Группа Ли G^2

Коммутационные соотношения: $[e_1, e_2] = e_4$, $[e_2, e_3] = e_5$, $[e_1, e_4] = e_6$, $[e_3, e_5] = e_6$. Пусть $\omega = a_{ij}e^i \wedge e^j$ — произвольная 2-форма. Оператор Хитчина $K_{d\omega}$ для общей формы ω имеет достаточно сложный вид. При этом, $K_{d\omega}^2 = (a_{46}^2 - a_{56}^2)Id$. Легко видеть, что форма ω является замкнутой только в том случае, когда

$$\omega = e^1 \wedge (a_{12}e^2 + a_{13}e^3 + a_{14}e^4 + a_{15}e^5) + e^2 \wedge (a_{23}e^3 + a_{24}e^4 + a_{25}e^5) + e^3 \wedge (-a_{15}e^4 + a_{35}e^5).$$

Такая форма ω является вырожденной. Условия замкнутости включают, в частности, равенство нулю коэффициентов a_{46} и a_{56} , которые определяет невырожденность $d\omega$. Поэтому мы ослабим условия замкнутости формы ω тем, что будем считать $a_{46} \neq 0$ и $a_{56} \neq 0$. Тогда обе формы ω и $d\omega$ являются невырожденными при $a_{46} \neq a_{56}$. Свойство $\omega \wedge d\omega = 0$ выполняется при условиях

$$-a_{12}a_{46} + a_{23}a_{56} = 0, \quad -a_{14}a_{56} + a_{15}a_{46} = 0, \quad -a_{15}a_{56} - a_{35}a_{46} = 0$$

$$d\omega = (a_{56}e^1 - a_{46}e^3) \wedge e^{45} + (-a_{46}e^1 + a_{56}e^3) \wedge e^{26}.$$

Функция $\lambda(d\omega)$ оператора Хитчина для 3-формы $d\omega$ имеет тот же вид $\lambda = (a_{46}^2 - a_{56}^2)^2$. Оператор $J = K_{d\omega} / |a_{46}^2 - a_{56}^2|$ задает почти паракомплексную структуру, $J^2 = Id$, обладающую свойством $\omega(JX, JY) = -\omega(X, Y)$. Определим псевдориманову метрику $g(X, Y) = \omega(X, JY)$ сигнатуры (3,3). Прямые вычисления в системе Maple показывают, что данная метрика имеет следующую скалярную кривизну:

$$R = -\frac{|a_{46}^2 - a_{56}^2|}{a_{13}(a_{24}a_{56} - a_{25}a_{46})}.$$

В частном случае, когда один из параметров a_{46} и a_{56} равен нулю, ситуация становится более простой. Пусть, например, $a_{56} = 0$. Свойство $\omega \wedge d\omega = 0$ выполняется при условиях: $a_{12} = 0$, $a_{15} = 0$, $a_{35} = 0$. Тогда 2-форма является невырожденной при условии $a_{13}a_{25}a_{46} \neq 0$ и мы имеем следующие выражения:

$$\begin{aligned}\omega &= e^1 \wedge (a_{13}e^3 + a_{14}e^4) + e^2 \wedge (a_{23}e^3 + a_{24}e^4 + a_{25}e^5) + a_{46}e^4 \wedge e^6, \\ d\omega &= -a_{46}e^{126} - a_{46}e^{345}, \\ \omega^2/2 &= -a_{13}a_{25}e^{1235} + (-a_{13}a_{24} + a_{14}a_{23})e^{1234} - a_{14}a_{25}e^{1245} + \\ &\quad + a_{13}a_{46}e^{1346} + a_{23}a_{46}e^{2346} - a_{25}a_{46}e^{2456}, \\ \omega^3 &= 6a_{13}a_{25}a_{46}e^{123456}, \\ \rho^\wedge = J^*(\rho) &= -a_{46}e^{345} + a_{46}e^{126}, \quad \rho^\wedge \wedge \rho = 2a_{46}^2e^{123456}, \\ d\rho^\wedge &= dJ^*(d\omega) = -2a_{46}e^{1235}.\end{aligned}$$

Пара (ω, ρ) при $\rho = d\omega$ определяет полуплоскую структуру. Условие нормализации $\rho^\wedge \wedge \rho = 2\omega^3/3$ выполняется, если $a_{46} = 2a_{13}a_{25}$. Будем считать коэффициенты a_{ij} зависящими от времени t и рассмотрим уравнения Хитчина [7] для построения псевдоримановой метрики на $G \times I$ с группой голономии из G_2^* , определенной 3-формой $\varphi = \omega \wedge dt + d\omega$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = d\omega, \quad \frac{\partial}{\partial t}\omega^\wedge = d\rho^\wedge,$$

где $\omega^\wedge = \omega^2/2$ и $\rho^\wedge = J_\rho^*\rho$. В нашем случае $\rho = d\omega$. Поэтому из первого уравнения мы получаем $a_{46} = ce^t$. Из второго уравнения получаем, в частности, что $a_{13}a_{46}$, $a_{25}a_{46}$ являются константами. Поэтому, с точностью до констант, $a_{13} = a_{25} = e^{-t}$. Мы получаем $a_{13}a_{25} = ae^{-2t}$, что делает невозможным выполнение второго уравнения и условия нормализации.

Таким образом, для рассматриваемого класса структур (ω, ρ) не существует псевдоримановой метрики на $G \times I$ с группой голономии из G_2^* . В то же время, 3-форма $\varphi = \omega \wedge dt + d\omega$ на $G \times I$ является замкнутой, если $a_{46} = ce^t$.

Псевдориманова метрика $g(X, Y) = \omega(X, JY)$ в случае $a_{56} = 0$ имеет вид

$$g = -2e^1(a_{13}e^3 + a_{14}e^4 + a_{15}e^5) - 2e^2(a_{23}e^3 + a_{24}e^4 + a_{25}e^5) + 2a_{46}e^4e^6.$$

Прямые вычисления в системе Maple показывают, что при $a_{14} = a_{24} = 0$ данная метрика имеет диагональный оператор Риччи с двумя собственными значениями:

$$RIC(g) = \frac{a_{46}}{2a_{25}a_{13}} \text{diag}\{-1, -1, -1, +1, -1, +1\}.$$

3.3. Группа Ли G^3

Коммутационные соотношения: $[e_1, e_2] = e_4$, $[e_1, e_3] = e_5$, $[e_1, e_4] = e_6$, $[e_3, e_5] = e_6$. Пусть $\omega = a_{ij}e^i \wedge e^j$ – произвольная 2-форма. Оператор Хитчина $K_{d\omega}$ для общей формы ω имеет достаточно сложный вид. При этом $K_{d\omega}^2 = a_{46}^4 Id$. Если $\lambda = a_{46}^4 \neq 0$ форма $d\omega$ является невырожденной. Оператор $J = K_{d\omega}/a_{46}^2$ определяет на $\mathfrak{g}$ левоинвариантную почти пара-комплексную структуру. Легко видеть, что форма ω является замкнутой только в том случае, когда

$$\omega = e^1 \wedge (a_{12}e^2 + a_{13}e^3 + a_{14}e^4 + a_{15}e^5) + e^2 \wedge (a_{23}e^3 + a_{24}e^4 + a_{25}e^5) + e^3 \wedge (a_{25}e^4 + a_{35}e^5).$$

Такая форма вырожденная и мы видим, в частности, что $a_{46} = 0$. Если мы ослабим условия замкнутости и будем считать, что $a_{46} \neq 0$, то обе формы ω и $d\omega$ будут невырожденными и свойство $\omega \wedge d\omega = 0$ выполняется при условии $a_{12} = 0$, $a_{25} = 0$, $a_{35} = 0$. Тогда форма ω невырождена, если $a_{15}a_{23}a_{46} \neq 0$, и мы получаем

$$\begin{aligned} \omega &= e^1 \wedge (a_{13}e^3 + a_{14}e^4 + a_{15}e^5) + e^2 \wedge (a_{23}e^3 + a_{24}e^4) + a_{46}e^4 \wedge e^6, \\ d\omega &= -a_{46}(e^{126} + e^{345}), \\ \omega^2/2 &= a_{15}a_{23}e^{1235} + (-a_{13}a_{24} + a_{14}a_{23})e^{1234} + a_{15}a_{24}e^{1245} + \\ &\quad + a_{13}a_{46}e^{1346} - a_{15}a_{46}e^{1456} + a_{23}a_{46}e^{2346}, \\ \omega^3 &= -6a_{15}a_{23}a_{46}e^{123456}, \\ \hat{\rho} = J^*(\rho) &= -a_{46}e^{345} + a_{46}e^{126}, \quad \hat{\rho} \wedge \rho = 2a_{46}^2e^{123456}, \\ d\hat{\rho} &= dJ^*(d\omega) = -2a_{46}e^{1235}. \end{aligned}$$

Пара (ω, ρ) при $\rho = d\omega$ определяет полуплоскую структуру. Условие нормализации $\hat{\rho} \wedge \rho = 2\omega^3/3$ выполняется, если $a_{46} = -2a_{15}a_{23}$. Будем считать коэффициенты a_{ij} зависящими от времени t и рассмотрим уравнения Хитчина [7] для построения псевдоримановой метрики на $G \times I$ с группой голономии из G_2^* , определенной 3-формой $\phi = \omega \wedge dt + d\omega$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho = d\omega, \quad \frac{\partial}{\partial t}\omega^\wedge = d\hat{\rho},$$

где $\omega^\wedge = \omega^2/2$ и $\hat{\rho} = J^*\rho$. В нашем случае $\rho = d\omega$. Поэтому из первого уравнения мы получаем $a_{46} = ce^t$. Из второго уравнения видим, в частности, что $a_{15}a_{46}$, $a_{23}a_{46}$ являются константами. Поэтому, с точностью до констант, $a_{15} = a_{23} = e^{-t}$. Получаем $a_{15}a_{23} = ae^{-2t}$, что делает невозможным выполнение второго уравнения и условия нормализации.

Таким образом, для рассматриваемого класса структур (ω, ρ) не существует псевдоримановой метрики на $G \times I$ с группой голономии из G_2^* . В то же время 3-форма $\phi = \omega \wedge dt + d\omega$ на $G \times I$ является замкнутой, если $a_{46} = ce^t$.

Оператор Хитчина для 3-формы $d\omega$ имеет диагональный вид, $K_{d\omega} = \text{diag}\{-a_{46}^2, -a_{46}^2, a_{46}^2, a_{46}^2, a_{46}^2, -a_{46}^2\}$. Оператор $J = K_{d\omega}/a_{46}^2$ задает почти пара-комплексную структуру, $J^2 = Id$, обладающую свойством $\omega(JX, JY) = -\omega(X, Y)$. Определим псевдориманову метрику $g(X, Y) = \omega(X, JY)$ сигнатуры $(3, 3)$. Она имеет вид

$$g = 2e^1(a_{13}e^3 + a_{14}e^4 + a_{15}e^5) + 2a_{23}e^2e^3 + 2a_{24}e^2e^4 - 2a_{46}e^4e^6.$$

Прямые вычисления в системе Maple показывают, что при $a_{14} = a_{24} = 0$ данная метрика имеет диагональный оператор Риччи с двумя собственными значениями:

$$RIC(g) = \frac{a_{46}}{2a_{15}a_{23}} \text{diag}\{-1, -1, -1, +1, -1, +1\}.$$

3.4. Группа Ли G^4

Коммутационные соотношения: $[e_1, e_2] = e_3$, $[e_1, e_3] = e_4$, $[e_1, e_4] = e_5$, $[e_3, e_4] = e_6$, $[e_2, e_5] = -e_6$. Пусть $\omega = a_{ij}e^i \wedge e^j$ – произвольная левоинвариантная невырожденная 2-форма. Для такой общей формы квадрат оператора Хитчина [6] для 3-формы $d\omega$ имеет диагональный вид: $K_{d\omega} = (a_{46}^2 - 2a_{36}a_{56})^2 Id$. Поэтому 3-форма $d\omega$ является невырожденной при $a_{46}^2 - 2a_{36}a_{56} \neq 0$. Форма ω является замкнутой только в том случае, когда она имеет вид

$$\omega = e^1 \wedge (a_{12} e^2 + a_{13} e^3 + a_{14} e^4 + a_{15} e^5) + e^2 \wedge (a_{23} e^3 - a_{34} e^5) + a_{34} e^3 \wedge e^4.$$

Такая форма ω является вырожденной. Условия замкнутости включают, в частности, равенство нулю коэффициентов a_{46} , a_{36} и a_{56} , которое определяет невырожденность $d\omega$. Для сохранения невырожденности форм ω и $d\omega$ при минимальном ослаблении свойства замкнутости ω , возможны два случая: $a_{46} \neq 0$ или $a_{36} \neq 0$ и $a_{56} \neq 0$. Однако, если $a_{56} \neq 0$, то простые вычисления показывают, что свойство $\omega \wedge d\omega = 0$ несовместимо с невырожденностью ω . Поэтому рассмотрим случай, когда $a_{46} \neq 0$. Тогда $K_{d\omega} = a_{46}^4 Id$. Кроме того, $\omega \wedge d\omega = 0$ при условии $a_{13} = 0$ и $a_{34} = 0$. Тогда форма ω невырожденная при условии $a_{23}a_{15}a_{46} \neq 0$, а формы ω и $d\omega$ принимают вид

$$\begin{aligned}\omega &= e^1 \wedge (a_{12} e^2 + a_{14} e^4 + a_{15} e^5) - a_{23} e^2 \wedge e^3 + a_{46} e^4 \wedge e^6, \\ d\omega &= a_{46}(-e^{136} + e^{245}).\end{aligned}$$

Оператор $K_{d\omega}$ для 3-формы $d\omega$ имеет диагональный вид, $K_{d\omega} = \text{diag}\{-a_{46}^2, a_{46}^2, -a_{46}^2, a_{46}^2, a_{46}^2, -a_{46}^2\}$. Определим оператор $J = K_{d\omega} / a_{46}^2$, он задает почти паракомплексную структуру, $J^2 = Id$, обладающую свойством $\omega(JX, JY) = -\omega(X, Y)$. Мы имеем следующие выражения:

$$\begin{aligned}\omega &= e^1 \wedge (a_{12} e^2 + a_{14} e^4 + a_{15} e^5) - a_{23} e^2 \wedge e^3 + a_{46} e^4 \wedge e^6, \\ d\omega &= \rho = a_{46}(-e^{136} + e^{245}), \\ \omega^2/2 &= a_{15}a_{23} e^{1235} + a_{14}a_{23} e^{1234} + a_{12}a_{46} e^{1246} - a_{15}a_{46} e^{1456} + a_{23}a_{46} e^{2346}, \\ \omega^3 &= -6a_{15}a_{23}a_{46} e^{123456}, \\ \rho^\wedge &= J^*(\rho) = a_{46}(e^{136} + e^{245}), \quad \rho^\wedge \wedge \rho = 2a_{46}^2 e^{123456}, \\ d\rho^\wedge &= dJ^*(d\omega) = -2a_{46} e^{1235}.\end{aligned}$$

Таким образом, пара (ω, ρ) при $\rho = d\omega$ определяет полуплоскую структуру. Отметим, что в работе [13] показано, что на данной группе Ли не существует полуплоских $SU(3)$ -структур. Условие нормализации $\rho^\wedge \wedge \rho = 2\omega^3/3$ выполняется, если $a_{46} = -2a_{15}a_{23}$. Рассуждения, такие же как для других групп, показывают, что для пары (ω, ρ) при $\rho = d\omega$ не удастся построить методом потока Хитчина псевдориманову метрику на $G \times I$ с группой голономии из G_2^* . Однако 3-форма $\varphi = \omega \wedge dt + d\omega$ на $G \times I$ является замкнутой, если $a_{46} = ce^t$.

Определим псевдориманову метрику $g(X, Y) = \omega(X, JY)$. Она имеет сигнатуру $(3, 3)$ и следующий вид:

$$g = 2e^1(a_{12}e^2 + a_{14}e^4 + a_{15}e^5) - 2a_{23}e^2e^3 - 2a_{46}e^4e^6.$$

Прямые вычисления в системе Maple показывают, что при $a_{14} = 0$ данная метрика имеет диагональный оператор Риччи с двумя собственными значениями:

$$RIC(g) = \frac{a_{46}}{2a_{15}a_{23}} \text{diag}\{-1, -1, -1, +1, -1, +1\}.$$

Закключение. На группах Ли $G^1 - G^4$ любая левинвариантная замкнутая 2-форма ω является вырожденной. Можно ослабить требование замкнутости для сохранения невырожденности ω и $d\omega$ и выполнения свойства $\omega \wedge d\omega = 0$. Оператор Хитчина $K_{d\omega}$, соответствующий 3-форме $d\omega$, определяет почти пара-комплексную структуру J . Псевдориманова метрика $g(X, Y) = \omega(X, JY)$ зависит от 5 до 7 параметров, имеет сигнатуру (3,3) и при обращении в нуль нескольких параметров, оператор Риччи имеет диагональный вид с двумя собственными значениями. Пара (ω, ρ) , где в качестве 3-формы ρ выступает $d\omega$, является согласованной и нормализованной. Пара-комплексная форма (3,0)-форма имеет вид $\Psi = d\omega + i_\varepsilon d\omega^\wedge$, где i_ε – паракompлексная единица. Таким образом, на группах Ли $G^1 - G^4$ естественным образом определены многопараметрические семейства почти пара-эрмитовых полуплоских структур с диагональным оператором Риччи с двумя собственными значениями. Для рассматриваемого класса структур (ω, ρ) не существует псевдоримановой метрики на $G \times I$ с группой голономии из G_2^* . В то же время, 3-форма $\varphi = \omega \wedge dt + d\omega$ на $G \times I$ является замкнутой.

3.5. Группа Ли G^5

Ненулевые коммутационные соотношения: $[e_1, e_2] = e_3$, $[e_1, e_3] = e_4$, $[e_1, e_4] = e_5$, $[e_2, e_3] = e_5$, $[e_3, e_4] = e_6$, $[e_2, e_5] = -e_6$. Пусть $\omega = a_{ij}e^i \wedge e^j$ – произвольная левинвариантная 2-форма. Для общей формы ω оператор Хитчина K_ω имеет достаточно сложный вид и следующую функцию $\lambda(d\omega)$:

$$\lambda = 4(a_{16}a_{56}^2 + 4a_{35}a_{56}^2 + 4a_{36}^2a_{56} - 4a_{36}a_{46}^2 - 4a_{45}a_{46}a_{56})a_{56} + a_{46}^4.$$

Таким образом, вообще говоря, форма $d\omega$ является невырожденной. Легко видеть, что форма ω является замкнутой только в том случае, когда $a_{16} = a_{26} = a_{36} = a_{35} = a_{45} = a_{46} = a_{56} = 0$ и $a_{34} = -a_{25}$, $a_{24} = a_{15}$. Однако такая форма ω является вырожденной. Есть несколько естественных способов ослабить требование замкнутости формы ω , чтобы не потерять невырожденность ω и $d\omega$.

Вариант 1. В том случае для невырожденности $K_{d\omega}$ мы предполагаем нулевыми оба коэффициента a_{46} и a_{56} . Тогда свойство $\omega \wedge d\omega = 0$ выполняется при условии $a_{15} = 0$, $a_{25} = 0$ и $a_{12}a_{56} = a_{13}a_{46}$, $a_{23} = -a_{14}$. Форма ω является невырожденной при условии $a_{14}a_{56} \neq 0$ и формы ω и $d\omega$ принимают вид

$$\omega = e^1 \wedge (a_{13}a_{46}/a_{56}e^2 + a_{13}e^3 + a_{14}e^4) - a_{14}e^2 \wedge e^3 + a_{46}e^4 \wedge e^6 + a_{56}e^5 \wedge e^6,$$

$$d\omega = -a_{46}e^{136} + a_{46}e^{245} - a_{56}e^{146} - a_{56}e^{236} + a_{56}e^{345},$$

$$\omega^2/2 = -a_{14}^2e^{1234} + a_{13}a_{46}^2/a_{56}e^{1246} + a_{13}a_{46}e^{1256} + a_{13}a_{46}e^{1346} +$$

$$+ a_{13}a_{56}e^{1356} + a_{14}a_{56}e^{1456} - a_{14}a_{46}e^{2346} - a_{14}a_{56}e^{2356},$$

$$\omega^3 = -6a_{14}^2a_{56}e^{123456},$$

$$\rho^\wedge = J^*(\rho) = a_{46}e^{136} + a_{56}e^{146} + a_{56}e^{236} + a_{46}e^{245} + a_{56}^2/a_{46}e^{246} + a_{56}e^{345} + a_{56}^3/a_{46}^2e^{346},$$

$$\rho^\wedge \rho = 2a_{46}^2e^{123456},$$

$$d\rho^\wedge = dJ^*(d\omega) = -2a_{46}e^{1235} - 2a_{56}^3/a_{46}^2e^{1236} - 2a_{56}e^{1245} - 2a_{56}^3/a_{46}^2e^{1246} + 2a_{56}^3/a_{46}^2e^{2345}.$$

Пара (ω, ρ) при $\rho = d\omega$ определяет полуплоскую структуру. Отметим, что в работе [13] показано, что на данной группе Ли не существует полуплоских $SU(3)$ -структур. Условие нормализации $\rho^\wedge \rho = 2\omega^3/3$ выполняется, если $a_{46}^2 = -2a_{14}^2a_{56}$. Будем считать коэффициенты a_{ij} зависящими от времени t и рассмотрим уравнения Хитчина [7] для построения псевдоримановой метрики на $G \times I$ с группой голономии из G_2^* , определенной 3-формой $\varphi = \omega \wedge dt + d\omega$:

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = d\omega, \quad \frac{\partial}{\partial t} \omega^\wedge = d\rho^\wedge,$$

где $\omega^\wedge = \omega^2/2$ и $\rho^\wedge = J_\rho^* \rho$. В нашем случае $\rho = d\omega$. Поэтому из первого уравнения мы получаем $a_{46} = ce^t$ и $a_{56} = de^t$. Из второго уравнения мы получаем, в частности, что a_{14} , $a_{14}a_{56}$ являются константами. Это противоречит выполнению второго уравнения и условию нормализации.

Таким образом, для рассматриваемого класса структур (ω, ρ) не существует псевдоримановой метрики на $G \times I$ с группой голономии из G_2^* . Однако 3-форма $\varphi = \omega \wedge dt + d\omega$ на $G \times I$ является замкнутой, если $a_{46} = ce^t$ и $a_{56} = de^t$.

Функция $\lambda(d\omega)$ оператора Хитчина $K_{d\omega}$ для 3-формы $d\omega$ принимает вид $\lambda = a_{46}^4$. Рассмотрим оператор $J = K_{d\omega} / a_{46}^2$. Он определяет левоинвариантную почти паракомплексную структуру $J^2 = Id$, обладающую свойством $\omega(JX, JY) = -\omega(X, Y)$. Определим псевдориманову метрику $g(X, Y) = \omega(X, JY)$ сигнатуры (3,3). Она имеет вид

$$\begin{aligned} g = & 2e^1(a_{13}a_{46}/a_{56}e^2 + a_{13}e^3 + a_{14}e^4) + \\ & + 2e^2(a_{13}e^2 + (2a_{13}a_{56} + a_{14}a_{46})/a_{46}e^3 + 2a_{14}a_{56}/a_{46}e^4) + \\ & + 2e^3(a_{56}(a_{13}a_{56} + a_{14}a_{46})/a_{46}^2e^3 + 2a_{14}a_{56}^2/a_{46}^2e^4) - \\ & - 2a_{46}e^4e^6 - 2a_{56}e^5e^6 - 2a_{56}^3/a_{46}^2e^6e^6. \end{aligned}$$

Прямые вычисления тензора кривизны показывают, что данная метрика имеет скалярную кривизну

$$R = \frac{-8a_{14}a_{46}a_{56}^6 - a_{46}^8 + 8a_{13}a_{56}^7}{a_{56}a_{14}^2a_{46}^6}.$$

Вариант 2. Возьмем форму ω в виде $\omega = \omega_0 + \omega_C$, где ω_0 – общая замкнутая 2-форма и ω_C – невырожденная 2-форма на идеале $C^2\mathfrak{g} = \mathbb{R}\{e_4, e_5, e_6\}$. Потребуем от формы ω выполнения свойства $\omega \wedge d\omega = 0$:

$$a_{25} = 0, a_{15} = 0, a_{12}a_{56} = a_{13}a_{46}, a_{56}a_{23} + a_{14}a_{56} = 0.$$

Тогда форма ω является невырожденной при условии $a_{14}a_{56} \neq 0$. Формы ω и $d\omega$ принимают вид

$$\begin{aligned} \omega = & e^1 \wedge (a_{13}a_{46}/a_{56}e^2 + a_{13}e^3 + a_{14}e^4) - a_{14}e^2 \wedge e^3 + a_{45}e^4 \wedge e^5 + a_{46}e^4 \wedge e^6 + a_{56}e^5 \wedge e^6, \\ d\omega = & a_{45}e^{234} - a_{45}e^{135} - a_{46}e^{136} + a_{46}e^{245} - a_{56}e^{146} - a_{56}e^{236} + a_{56}e^{345}, \\ \omega^2 = & -2a_{14}a_{56}e^{2356} - a_{14}(1+a_{46}^4)/(a_{46}a_{56}^2)e^{2345} + a_{13}(1+a_{46}^4)/(2a_{56}^3)e^{1245} + \\ & + 2a_{13}a_{46}^4/a_{56}e^{1246} + 2a_{13}a_{46}e^{1256} - 2a_{14}a_{46}e^{2346} - 2a_{14}^2e^{1234} + 2a_{13}a_{56}e^{1356} + \\ & + 2a_{14}a_{56}e^{1456} + 2a_{13}a_{46}e^{1346} + a_{13}(1+a_{46}^4)/(2a_{46}a_{56}^2)e^{1345}, \\ \omega^3 = & -6a_{14}^2a_{56}e^{123456}. \end{aligned}$$

В этом случае функция $\lambda(d\omega)$ выражается формулой $\lambda = a_{46}^4 - 4a_{46}a_{45}a_{56}^2$ и может принимать как положительные, так и отрицательные значения.

Случай 1. Функция $\lambda(d\omega)$ принимает значение -1 при $a_{45} = (a_{46}^4 + 1)/(4a_{46}a_{56}^2)$. Тогда оператор $J = K_{d\omega}$ определяет почти комплексную структуру, согласованную с ω . Прямые вычисления показывают:

$$\begin{aligned} \omega^2 = & -2a_{14}^2e^{1234} + a_{13}(1+a_{46}^4)/(2a_{56}^3)e^{1245} + 2a_{13}a_{46}^2/a_{56}e^{1246} + \\ & + 2a_{13}a_{46}e^{1256} + a_{13}(1+a_{46}^4)/(2a_{46}a_{56}^2)e^{1345} + 2a_{13}a_{46}e^{1346} + 2a_{13}a_{56}e^{1356} + \\ & + 2a_{14}a_{56}e^{1456} - 2a_{14}a_{56}e^{2356} - a_{14}(1+a_{46}^4)/(2a_{46}a_{56}^2)e^{2345} - 2a_{14}a_{46}e^{2346}, \\ \omega^3 = & -6a_{14}^2a_{56}e^{123456}, \quad \rho^\wedge \wedge \rho = 2e^{123456} \end{aligned}$$

В этом случае пара (ω, ρ) при $\rho = d\omega$ определяет полуплоскую структуру. Условие нормализации $\rho \wedge \rho = 2\omega^3/3$ выполняется, если $a_{56} = -1/(2a_{14}^2)$. Однако построить псевдориманову метрику на $G \times I$ с группой голономии из G_2^* не удастся. Тем не менее 3-форма $\varphi = \omega \wedge dt + d\omega$ на $G \times I$ является замкнутой.

Зададим псевдориманову метрику сигнатуры (2,4) по формуле $g(X, Y) = \omega(X, JY)$. Прямые вычисления тензора кривизны в системе Maple показывают, что данная метрика имеет скалярную кривизну

$$R = \frac{8a_{13}a_{56}^7 - 8a_{14}a_{46}a_{56}^6 - 1}{a_{56}a_{14}^2}.$$

Случай 2. Функция $\lambda(d\omega)$ принимает значение +1 при $a_{45} = (a_{46}^4 - 1)/(4a_{46}a_{56}^2)$. Тогда оператор $J = K_{d\omega}$ определяет почти пара-комплексную структуру, согласованную с ω и имеет такую же матрицу, что и у приведенной выше почти комплексной структуры J , где вместо $a_{46}^4 + 1$ нужно подставить $a_{46}^4 - 1$. При $a_{56} = -1/(2a_{14}^2)$ выполняется условие нормализации, пара (ω, ρ) при $\rho = d\omega$ определяет полуплоскую структуру. Однако построить псевдориманову метрику на $G \times I$ с группой голономии из G_2^* не удастся. Можно только утверждать, что 3-форма $\varphi = \omega \wedge dt + d\omega$ на $G \times I$ является замкнутой.

Соответствующая метрика $g(X, Y) = \omega(X, JY)$ – псевдориманова сигнатуры (3,3) и имеет такую же скалярную кривизну, что и в первом случае.

Выводы. На группе Ли G^5 любая левоинвариантная замкнутая 2-форма ω является вырожденной. Существует несколько способов ослабить требование замкнутости для сохранения невырожденности ω , причем так, что 3-форма $d\omega$ является невырожденной и выполняется свойство $\omega \wedge d\omega = 0$. Согласованная пара $(\omega, d\omega)$ определяет либо почти комплексную структуру, либо почти пара-комплексную – в зависимости от выбора ω . Ассоциированная метрика $g(X, Y) = \omega(X, J_{d\omega}Y)$ – псевдориманова сигнатуры (2,4) или (3,3). Пара $(\omega, d\omega)$ определяет полуплоскую структуру. Отметим, что в работе [13] показано, что на данной группе Ли не существует полуплоских $SU(3)$ -структур. Таким образом, на группе Ли G^5 естественным образом определены псевдо почти эрмитовы полуплоские и почти пара-эрмитовы полуплоские структуры, которые не являются эйнштейновыми. Для рассматриваемого класса структур (ω, ρ) не существует псевдоримановой метрики на $G \times I$ с группой голономии из G_2^* . Однако 3-форма $\varphi = \omega \wedge dt + d\omega$ на $G \times I$ является замкнутой.

Результаты работы были доложены на Всероссийской конференции по математике и механике, посвященной 140-летию Томского государственного университета и 70-летию механико-математического факультета ТГУ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Salamon S. Complex structures on nilpotent Lie algebras // J. Pure Appl. Algebra. 2001. V. 157. P. 311–333. doi.org/10.1016/S0022-4049(00)00033-5.
2. Goze M., Khakimdjanyov Y., Medina A. Symplectic or contact structures on Lie groups // Diff. Geom. Appl. 2004. V. 21. No. 1. P. 41–54. doi.org/10.1016/j.difgeo.2003.12.006.
3. Benson C., Gordon C.S. Kähler and symplectic structures on nilmanifolds // Topology. 1988. V. 27. P. 513–518.
4. Cordero L.A., Fernández M., Ugarte L. Pseudo-Kähler metrics on six-dimensional nilpotent Lie algebras // J. of Geom. and Phys. 2004. V. 50. P. 115–137. doi:10.1016/j.geomphys.2003.12.003.

5. Смоленцев Н.К. Канонические псевдокэлеровы метрики на шестимерных нильпотентных группах Ли // Вестник КемГУ. 2011. № 3/1 (47). С. 155–168 (arXiv:1310.5395 [math.DG]).
6. Smolentsev N.K. Canonical almost pseudo-Kähler structures on six-dimensional nilpotent Lie groups. 2013. arXiv: 1311.4248 [math.DG]. 26 p.
7. Cortés V., Leistner T., Schäfer L., Schulte-Hengesbach F. Half-flat structures and special holonomy // Proc. London Math. Soc. 2011. V. 102. No. 1. P. 113–158. DOI: 10.1112/plms/pdq012 (arXiv:0907.1222v1 [math.DG])
8. Smolentsev N.K. Left-invariant almost para-complex Einsteinian structures on six-dimensional nilpotent Lie groups // Science Evolution. 2017. V. 2. No. 2. P. 88–95.
9. Kobayashi S. and Nomizu K. Foundations of Differential Geometry. Vol. 1 and 2. New York; London: Interscience Publ., 1963.
10. Hitchin N.J. The geometry of three-forms in six dimensions // J. Diff. Geom. 2000. V. 55. P. 547–576. doi:10.4310/jdg/1090341263.
11. Алексеевский Д.В., Медори К., Томассини А. Однородные пара-кэлеровы многообразия Эйнштейна // УМН. 2009. Т. 64. Вып. 1(385). С. 3–50. DOI: <https://doi.org/10.4213/rm9262>.
12. Hitchin N. Stable forms and special metrics // Global differential geometry: the mathematical legacy of Alfred Gray (Bilbao, 2000). P. 70–89. DOI: <http://dx.doi.org/10.1090/conm/288>. (arXiv:math/0107101v1 [math.DG]).
13. Conti D. Half-flat nilmanifolds // Math. Ann. 2011. V. 350(1). P. 155–168. (arXiv:0903.1175 [math.DG]).

Статья поступила 01.11.2018 г.

Smolentsev N.K. (2019) LEFT-INVARIANT ALMOST PARA-HERMITIAN STRUCTURES ON SOME SIX-DIMENSIONAL NILPOTENT LIE GROUPS. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 58. pp. 41–55

DOI 10.17223/19988621/58/4

Keywords: nilmanifolds, six-dimensional nilpotent Lie algebras, left-invariant para-complex structures, Einstein manifolds, half-flat structures.

As is well known, there are 34 classes of isomorphic simply connected six-dimensional nilpotent Lie groups. Of these, only 26 classes admit left-invariant symplectic structures and only 18 classes admit left-invariant complex structures. There exist five six-dimensional nilpotent Lie groups G , which do not admit neither symplectic, nor complex structures and, therefore, can be neither almost pseudo-Kählerian, nor Hermitian. It is the Lie groups that are studied in this work. The aim of the paper is to define new left-invariant geometric structures on the Lie groups. If the left-invariant 2-form ω on such a Lie group is closed, then it is degenerate. Weakening the closedness requirement for left-invariant 2-forms ω , stable 2-forms ω are obtained. Their exterior differential $d\omega$ is also stable in Hitchin sense. Therefore, the pair $(\omega, d\omega)$ defines either an almost Hermitian or almost para-Hermitian structure on the group G . The corresponding pseudo-Riemannian metrics are Einstein for four of the five Lie groups under consideration. This gives new examples of multiparameter families of left-invariant Einstein pseudo-Riemannian metrics on six-dimensional nilmanifolds. On each of the Lie groups under consideration, compatible and normalized pairs of left-invariant forms (ω, ρ) , where $\rho = d\omega$, are obtained. They define semi-flat structures. The Hitchin flow on $G \times I$ is studied to construct a pseudo-Riemannian metric on $G \times I$ with a holonomy group from G_2^* and it is shown that there is no solution in this class of left-invariant half-plane structures (ω, ρ) . For structures (ω, ρ) , only the 3-form closure property $\varphi = \omega \wedge dt + d\omega$ on $G \times I$ holds.

AMS Mathematical Subject Classification: 53C15, 53C30, 53C25, 22E25

SMOLENTSEV Nikolay Konstantinovich (Doctor of Physics and Mathematics, professor of Fundamental Mathematics department of Kemerovo State University, Kemerovo, Russian Federation). E-mail: smolennk@mail.ru

REFERENCES

1. Salamon S. (2001) Complex structures on nilpotent Lie algebras. *J. Pure Appl. Algebra*. 157. pp. 311–333. doi.org/10.1016/S0022-4049(00)00033-5.
2. Goze M., Khakimdjano Y., Medina A. (2004) Symplectic or contact structures on Lie groups. *Diff. Geom. Appl.* 21(1). pp. 41–54. doi.org/10.1016/j.difgeo.2003.12.006.
3. Benson C., Gordon C.S. (1988) Kähler and symplectic structures on nilmanifolds // *Topology*. 27. pp. 513–518.
4. Cordero L.A., Fernández M., Ugarte L. (2004) Pseudo-Kähler metrics on six-dimensional nilpotent Lie algebras. *J. of Geom. and Phys.* 50. pp. 115–137. doi:10.1016/j.geomphys.2003.12.003.
5. Smolentsev N.K. (2011) Kanonicheskie psevdokelerovy metriki na shestimernykh nil'potentnykh gruppakh Li (Canonical pseudo-Kähler metrics on six-dimensional nilpotent Lie groups). *Vestn. Kemerovsk. Gos. Univ., Ser. Mat.* 3/1(47). pp. 155–168. (In Russian), (arXiv:1310.5395 [math.DG]).
6. Smolentsev N.K. (2013) Canonical almost pseudo-Kähler structures on six-dimensional nilpotent Lie groups. *arXiv: 1311.4248 [math.DG]*. 26 p.
7. Cortés V., Leistner T., Schäfer L., Schulte-Hengesbach F. (2011) Half-flat structures and special holonomy. *Proc. London Math. Soc.* 102(1). pp. 113–158. DOI: 10.1112/plms/pdq012 (arXiv:0907.1222v1 [math.DG]).
8. Smolentsev N.K. (2017) Left-invariant almost para-complex Einsteinian structures on six-dimensional nilpotent Lie groups. *Science Evolution*. 2(2). pp. 88–95.
9. Kobayashi S. and Nomizu K. (1963) *Foundations of Differential Geometry. Vol. 1 and 2*. New York; London: Interscience Publ.
10. Hitchin N.J. (2000) The geometry of three-forms in six dimensions // *J. Diff. Geom.* 55. pp. 547–576. doi:10.4310/jdg/1090341263.
11. Alekseevsky D.V., Medori C., Tomassini A. (2009) Homogeneous para-Kähler Einstein manifolds. *Russian Mathematical Surveys*. 64(1). pp. 1–43.
12. Hitchin N. Stable forms and special metrics. *Global differential geometry: the mathematical legacy of Alfred Gray* (Bilbao, 2000). pp. 70–89. DOI: http://dx.doi.org/10.1090/conm/288. (arXiv:math/0107101v1 math.DG)].
13. Conti D. (2011) Half-flat nilmanifolds. *Math. Ann.* 350(1). pp. 155–168. (arXiv:0903.1175 [math.DG]).

Received: November 1, 2018

МЕХАНИКА

УДК 532.555.2

DOI 10.17223/19988621/58/5

Е.И. Борзенко, К.Е. Рыльцева, Г.Р. Шрагер

**ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК
ТЕЧЕНИЯ НЕНЬЮТОНОВСКОЙ ЖИДКОСТИ
В ТРУБЕ С ВНЕЗАПНЫМ СУЖЕНИЕМ¹**

Сформулирована математическая модель ламинарного течения неньютоновской жидкости в трубе с внезапным сужением, которая включает уравнения движения и неразрывности в переменных функция тока – вихрь. Реологические свойства среды описаны степенным законом Оствальда – де Вилия. Стационарное решение задачи получено методом установления с последующей реализацией конечно-разностного метода на основе схемы переменных направлений. Выполнен анализ структуры течения, рассчитаны кинематические характеристики потока в зависимости от основных параметров задачи. На основе полученных данных проведены параметрические исследования коэффициента местного сопротивления для различных значений показателя нелинейности, степени сужения трубы и числа Рейнольдса.

Ключевые слова: *внезапное сужение, неньютоновская жидкость, модель Оствальда – де Вилия, схема продольно-поперечной прогонки, кинематические характеристики потока, число Рейнольдса, местное сопротивление.*

Течение жидкости через различные конструктивные особенности реализуется во многих технических приложениях, связанных с транспортом жидких сред. В частности, резкое уменьшение диаметра канала, которое представляет собой внезапное сужение, часто встречается в качестве элемента трубопроводов, экс-трудеров, реакторов и т.д. В подобном оборудовании имеют место течения горючих материалов, расплавов и растворов полимерных жидкостей, которые требуют особого внимания и детального изучения для обеспечения эффективности и безопасности производства.

Задача о течении жидкости в канале с внезапным сужением привлекла внимание исследователей еще в середине прошлого столетия [1–3]. Большинство работ того времени посвящено экспериментальным исследованиям, которые выполнялись с помощью оборудования, способного визуализировать течение и представлять качественное поведение характеристик процесса. В работе [2] показана эволюция профиля скорости, реализуемая в канале с сужением. Выявлена тенденция изменения зоны двумерного течения, которая образуется сразу за скачком сечения, в зависимости от числа Рейнольдса, представлено сравнение полученных данных с результатами экспериментальных работ других авторов.

Стремительное развитие вычислительной техники и разработка численных методов привели к увеличению количества работ, посвященных численному иссле-

¹ Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-19-00021).

дованию течения жидкости в канале с внезапным сужением [4]. В работе [5] автор представил результаты решения задачи о течении жидкости в плоском канале с сужением методом конечных элементов. Показано влияние числа Рейнольдса на картину течения, интенсивность движения жидкости в циркуляционной зоне и общий перепад давления. Результаты применения конечно-разностного метода для решения задачи в переменных функция тока – вихрь опубликованы в статье [6]. Особое внимание уделено расчету значения вихря в угловой точке канала с сужением. В [7] задача решалась методом контрольных объемов с применением процедуры SIMPLE. Автор продемонстрировал преимущества данного метода над методом конечных элементов при моделировании течения неньютоновской жидкости в рассматриваемой геометрии. Повышение точности решения и скорости сходимости расчетного алгоритма удалось получить, используя метод конечных объемов совместно с высокоразрешающей схемой, приведенной в работе [8].

На сегодняшний день доступно множество работ, в которых представлены результаты исследования течения ньютоновской жидкости в канале с сужением, демонстрирующие структуру потока и основные кинематические характеристики процесса [9–12]. Однако интенсивное развитие промышленности и медицины сопровождается необходимостью исследования течения неньютоновских жидкостей, которые характеризуются сложными реологическими свойствами. Во многих случаях, например, при моделировании течения нефти, глицерина, целлюлозы, крови и т.д., удается достаточно точно описать реологические свойства жидкости, используя степенную модель Оствальда – де Вилля [2, 13, 14]. Данная модель позволяет рассмотреть поведение псевдопластичных, ньютоновских и дилатантных жидкостей.

В [15] представлены результаты численных и экспериментальных исследований течения степенной жидкости в канале с внезапным сужением. Показано, что структура течения формируется из зон одномерного течения в окрестности входного и выходного сечений, зон двумерного течения в области скачка сечения и циркуляционной зоны в окрестности угла. Проводится сравнение полученных значений длин зон двумерного течения с данными других авторов в зависимости от числа Рейнольдса. Однако отсутствуют функциональные зависимости длин зон двумерного течения от показателя нелинейности и степени сужения канала, которые также оказывают значительное влияние на характер и структуру потока.

Практическая значимость исследования течения жидкости в канале с сужением заключается в определении местных потерь давления. В обзорной части работы [15] отражено множество источников, в которых представлены результаты расчетов местных потерь давления для рассматриваемой геометрии. Автор также демонстрирует собственные данные, полученные в ходе экспериментального и численного исследования течения неньютоновской жидкости в каналах с различными степенями сужения. Сравнение зависимостей местного сопротивления от числа Рейнольдса показало частичное совпадение. При этом выявлены существенные расхождения между результатами экспериментов и численных расчетов. Анализ выполненных работ показывает, что необходимы дополнительные исследования течения неньютоновской жидкости в канале с внезапным сужением и получение количественных зависимостей местных потерь давления не только от числа Рейнольдса, но и от других параметров задачи.

Целью настоящей работы является определение характеристик структуры потока степенной жидкости в трубе с сужением в зависимости от определяющих параметров задачи и расчет коэффициента местного сопротивления для широкого

диапазона изменения числа Рейнольдса, показателя нелинейности жидкости и степени сужения трубы.

Физико-математическая постановка задачи

Рассматривается стационарное течение несжимаемой неньютоновской жидкости в трубе с внезапным сужением. Область течения Ω схематично представлена на рис. 1. Используется осесимметричная постановка задачи в цилиндрической системе координат.

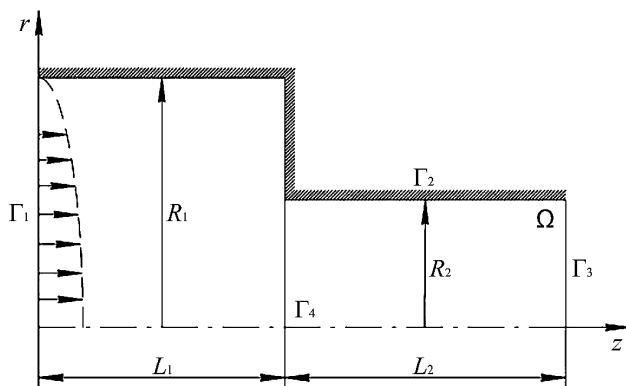


Рис. 1. Область решения

Fig. 1. Solution domain

Для математического описания течения записываются уравнения в переменных функция тока – вихрь, приведенные к безразмерному виду

$$\frac{\partial(v\omega)}{\partial r} + \frac{\partial(u\omega)}{\partial z} = \frac{2^n \cdot B}{\text{Re}} \left(\nabla^2 \omega - \frac{\omega}{r^2} \right) + \frac{2^n \cdot S}{\text{Re}}; \quad (1)$$

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

где функция тока (ψ), вихрь (ω) и источниковый член (S) определяются по формулам

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

$$S = 2 \frac{\partial^2 B}{\partial r \partial z} \left(\frac{\partial v}{\partial r} - \frac{\partial u}{\partial z} \right) + 2 \frac{\partial B}{\partial r} \frac{\partial \omega}{\partial r} + 2 \frac{\partial B}{\partial z} \frac{\partial \omega}{\partial z} + \left(\frac{\partial^2 B}{\partial z^2} - \frac{\partial^2 B}{\partial r^2} \right) \left(\frac{\partial v}{\partial z} + \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial B}{\partial r} \frac{\omega}{r}.$$

Реологические свойства среды описываются степенной моделью Оствальда – де Вилля, в которой безразмерная эффективная вязкость (B) вычисляется по формуле

$$B = A^{n-1}, \quad (3)$$

$$A = \left[2 \left(\frac{\partial u}{\partial z} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial v}{\partial r} \right)^2 + 2 \left(\frac{v}{r} \right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \right)^2 \right]^{1/2}.$$

Здесь v, u – радиальная и аксиальная компоненты скорости соответственно, A – ин-

тенсивность тензора скоростей деформаций, $Re = \rho U^{2-n} D^n / k$ – число Рейнольдса, $D = 2R_2$ – диаметр узкой части трубы, ρ – плотность жидкой среды, U – среднерасходная скорость в узкой части трубы, k – показатель консистенции, n – показатель нелинейности жидкости. Используются следующие масштабы обезразмеривания: скорости – скорость U , длины – радиус R_2 , давления – величина $\rho U^2 / 2$.

Жидкость поступает в трубу через входную границу Γ_1 с постоянным заданным расходом, профиль скорости при этом соответствует её установившемуся течению в бесконечной трубе. На твердой стенке Γ_2 выполняются условия прилипания, на оси Γ_4 – условия симметрии. На выходной границе Γ_3 задаются мягкие граничные условия. Входное и выходное сечения трубы располагаются на расстоянии от сужения, достаточном для реализации установившегося течения вблизи этих сечений при заданных параметрах задачи ($L_1/R_2 = 10$, $L_2/R_2 = 20$). Степень сужения трубы определяется отношением радиуса широкой части к радиусу узкой части $\beta = R_1/R_2$ (рис. 1). Условия на границах исследуемой области записываются в виде

$$\begin{aligned}\Gamma_1 : \psi &= \int_0^r u r dr, \quad \omega = -\frac{\partial u}{\partial r}, \quad z = 0, \quad 0 \leq r \leq \beta; \\ \Gamma_2 : \psi &= const, \quad \omega = -\frac{1}{\beta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}, \quad r = \beta, \quad 0 \leq z \leq \frac{L_1}{R_2}, \\ \psi &= const, \quad \omega = -\frac{1}{r} \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2}, \quad 1 \leq r \leq \beta, \quad z = \frac{L_1}{R_2}, \\ \psi &= const, \quad \omega = -\frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}, \quad r = 1, \quad \frac{L_1}{R_2} \leq z \leq \frac{L_1}{R_2} + \frac{L_2}{R_2}; \\ \Gamma_3 : \frac{\partial \psi}{\partial z} &= 0, \quad \frac{\partial \omega}{\partial z} = 0, \quad z = \frac{L_1}{R_2} + \frac{L_2}{R_2}; \\ \Gamma_4 : \psi &= 0, \quad \omega = 0, \quad r = 0.\end{aligned}$$

Метод решения

Для получения стационарного решения задачи используется метод установления, в соответствии с которым в основные уравнения добавляется фиктивная производная по времени [16]. Дискретизация уравнений выполняется конечно-разностным методом на основе схемы переменных направлений [17]. Решение преобразованных уравнений осуществляется методом прогонки [16].

Степенная реологическая модель жидкости при $n < 1$ дает «бесконечное» значение эффективной вязкости в окрестности оси симметрии, где $A \rightarrow 0$. Для реализации устойчивого расчета течения степенной жидкости во всей области течения, включая область малых значений A , проводится регуляризация реологической модели, которая предполагает внесение малого добавочного члена ε в выражение для эффективной вязкости. Учитывая добавку, формула (3) принимает вид

$$B = (A + \varepsilon)^{n-1}. \quad (4)$$

Данная модификация, допуская предельный переход к степенной модели при $\varepsilon \rightarrow 0$, расширяет диапазон изменения показателя нелинейности для устойчивого расчета [18].

Для верификации численного алгоритма на основе результатов тестовых расчетов выполняется проверка аппроксимационной сходимости. Профили аксиальной скорости, формируемые на стыке широкой и узкой частей трубы, при различных значениях шага квадратной сетки (h) показаны на рис. 2. Для случая $Re = 1$, $\beta = 2$, $n = 0.5$ рассчитанное значение аксиальной скорости на оси симметрии в выходном сечении трубы (u^*) сравнивалось со значением, полученным аналитически для трубы постоянного радиуса с полностью развитым течением

$$u_{ан}(r=0) = \frac{3n+1}{n+1}.$$

Значения относительной ошибки величины скорости ($E = |(u_{ан} - u^*)|/u_{ан} \cdot 100\%$) в зависимости от шага сетки и параметра регуляризации приведены в табл. 1 (при $\epsilon = 0.001$) и табл. 2 (при $h = 0.025$) соответственно. Результаты, представленные на рис. 2 и в табл. 1, демонстрируют аппроксимационную сходимость численного алгоритма. Для дальнейших расчетов выбран шаг сетки $h = 0.025$. Из табл. 2 видно, что при заданных параметрах $Re = 1$, $\beta = 2$, $n = 0.5$ уменьшение ϵ способствует уменьшению относительной ошибки E . Анализ данных позволяет выбрать в качестве параметра регуляризации $\epsilon = 0.001$.

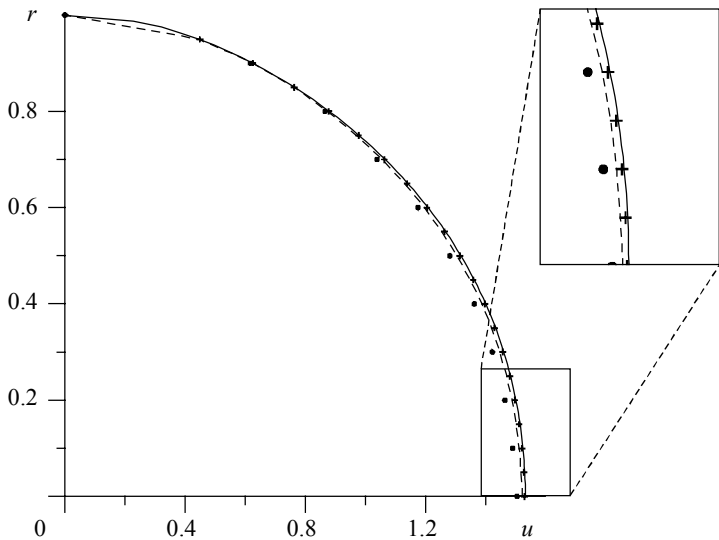


Рис. 2. Профиль аксиальной скорости в скачке сечения ($Re = 1$, $\beta = 2$, $n = 0.5$, $\epsilon = 0.001$).
Обозначения: ●●● – $h = 0.1$, - - - $h = 0.05$, + + + – $h = 0.025$, ——— – $h = 0.0125$
Fig. 2. Axial velocity profile at the contraction plane ($Re = 1$, $\beta = 2$, $n = 0.5$, and $\epsilon = 0.001$).
Notations: ●●● – $h = 0.1$, - - - $h = 0.05$, + + + – $h = 0.025$, ——— – $h = 0.0125$

Таблица 1

h	$E, \%$
0.1	1.550
0.05	0.292
0.025	0.071
0.0125	0.004

Таблица 2

ϵ	$E, \%$
0.1	1.765
0.05	0.969
0.01	0.188
0.005	0.053
0.001	0.031

В процессе течения жидкости в трубе со скачком сечения имеют место два вида потерь полного давления: потери на трение $\Delta P_{\text{тр}}$, которые являются следствием проявления вязких сил в потоке, и местные потери $\Delta P_{\text{м}}$ в окрестности скачка сечения [19]. Сумма указанных потерь представляет собой перепад полного давления между входной и выходной границами трубы:

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

Отношение потерь полного давления на участке к динамическому напору определяет коэффициент гидравлического сопротивления [19]

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

где $C_{\text{м}}$ – коэффициент местного сопротивления, $C_{\text{тр}}$ – коэффициент сопротивления трения, определяемый по формуле

$$C_{\text{тр}} = \frac{2^{3+n}}{\text{Re}} \left(\frac{3n+1}{n} \right)^n \cdot \frac{L_2}{D} \left[\frac{L_1}{L_2 \cdot \beta^{3n+1}} + 1 \right].$$

Расчетная формула для коэффициента местного сопротивления получается в результате применения уравнения Бернулли к сечениям, расположенным вверх и вниз по течению от внезапного сужения

$$C_{\text{м}} = \frac{\Delta p_{\text{м}}}{0.5\rho U^2} - \alpha \left(1 - \frac{1}{\beta^4} \right), \quad (5)$$

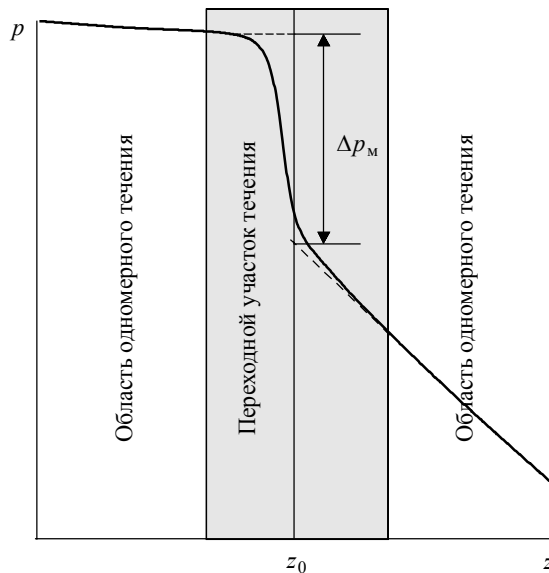


Рис. 3. Схематичное распределение давления вдоль трубы с внезапным сужением

Fig. 3. Schematic representation of the pressure distribution along a pipe with sudden contraction

где Δp_m – потери гидродинамического давления на преодоление сужения, α – коэффициент коррекции кинетической энергии, который учитывает неоднородность профиля скорости в трубе и рассчитывается по формуле [20]

$$\alpha = \frac{3(3n+1)^2}{(2n+1)(5n+3)}.$$

Значение Δp_m вычисляется экстраполяцией прямолинейных профилей давления на участках одномерного течения в сечение z_0 , где расположен скачок сечения (рис. 3).

Коэффициент местного гидравлического сопротивления можно также представить как отношение потерянной на участке между входом и выходом энергии (мощности) к кинетической энергии (мощности) во входном сечении [19]

$$C_m = \frac{\Delta N}{(1/2)\rho F U^3} - C_{тр}, \quad (6)$$

где $\Delta N = 2\pi \iint_{\Omega} B A^2 d\Omega$ – мощность, теряемая на данном участке, т.е. механическая

энергия, которая переходит в тепловую энергию за единицу времени [21], F – площадь входного сечения.

Результаты

Для проведения параметрических расчетов выбраны следующие диапазоны изменения основных параметров: $0.1 \leq Re \leq 100$, $1.25 \leq \beta \leq 4$, $0.6 \leq n \leq 1.5$. На основе полученных данных восстановлены картины течения дилатантной (рис. 4, *a*) и псевдопластичной (рис. 4, *b*) жидкостей. Видно, что характер и структура потока двух жидкостей качественно совпадает. В обоих случаях на достаточном удалении от скачка сечения вниз и вверх по потоку формируются зоны одномерного течения, а вблизи сужения – зона двумерного течения. В окрестности внутреннего угла образуется циркуляционная зона, размер которой увеличивается с ростом значения показателя нелинейности.

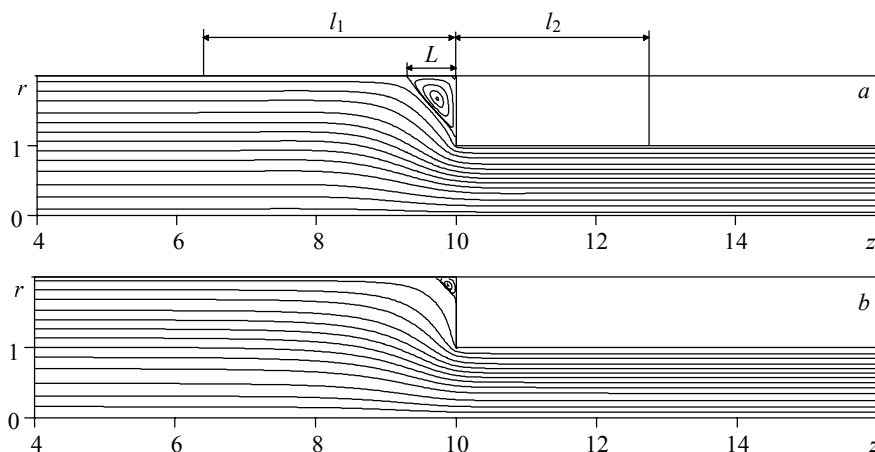


Рис. 4. Распределения линий тока: (а) $Re = 1$, $\beta = 2$, $n = 1.5$, (б) $Re = 1$, $\beta = 2$, $n = 0.5$
Fig. 4. Streamline distributions: (а) $Re = 1$, $\beta = 2$, and $n = 1.5$; (б) $Re = 1$, $\beta = 2$, and $n = 0.5$

Для количественного анализа течения вводятся безразмерные геометрические характеристики структуры потока (рис. 4, *a*): длины зон двумерного течения, формируемых до и после сужения (l_1 и l_2 соответственно), длина циркуляционной зоны (L). Величины l_1 и l_2 определяются расстоянием от скачка до поперечных сечений, в которых на оси симметрии аксиальная скорость принимает значения, отличные на 1% от тех, которые реализуются в области одномерного течения в узкой и широкой частях канала соответственно.

Зависимости длин зон двумерного течения от числа Рейнольдса, коэффициента сужения трубы и степени нелинейности жидкости представлены на рис. 5.

Изменения l_1 , l_2 , L имеют следующий характер:

- рост числа Рейнольдса способствует уменьшению l_1 и L и значительному увеличению l_2 за счет преобладания инерционных сил над вязкими силами (рис. 5, *a*);
- с увеличением степени сужения трубы происходит увеличение L и l_1 , при этом характер течения в узкой части трубы меняется слабо, поэтому изменение l_2 незначительно (рис. 5, *b*);
- при увеличении показателя нелинейности l_1 и l_2 монотонно уменьшаются, при этом значения L растут (рис. 5, *c*).

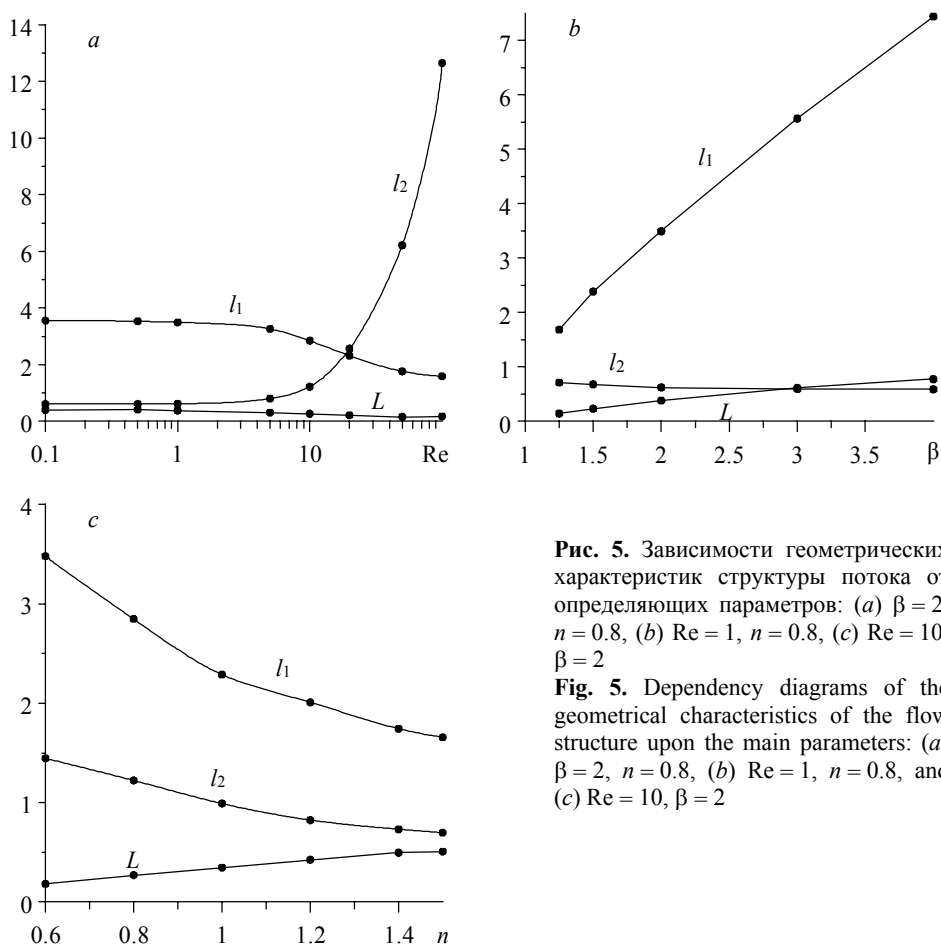


Рис. 5. Зависимости геометрических характеристик структуры потока от определяющих параметров: (а) $\beta = 2$, $n = 0.8$, (б) $Re = 1$, $n = 0.8$, (с) $Re = 10$, $\beta = 2$

Fig. 5. Dependency diagrams of the geometrical characteristics of the flow structure upon the main parameters: (а) $\beta = 2$, $n = 0.8$, (б) $Re = 1$, $n = 0.8$, and (с) $Re = 10$, $\beta = 2$

На рис. 6 представлены распределения линий тока в окрестности скачка сечения, взятые из [22] и полученные в данной работе. Сравнение проводится при следующих параметрах: $\beta = 4$, $Re = 10, 50$, $n = 0.5, 1$. Для всех рассмотренных случаев наблюдается хорошее согласование картин течения.

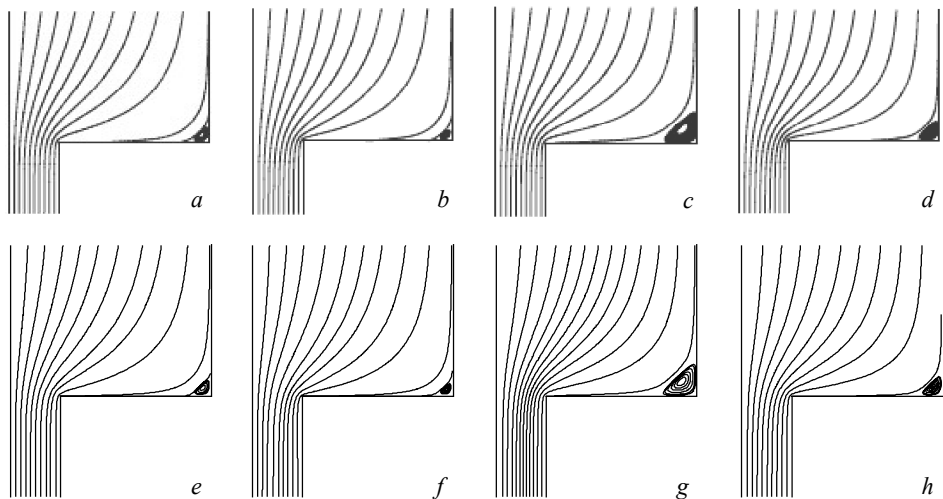


Рис. 6. Сравнение распределений линий тока из статьи [22] (*a, b, c, d*) и данной работы (*e, f, g, h*) для $\beta = 4$: (*a*), (*e*) $Re = 10$, $n = 0.5$; (*b*), (*f*) $Re = 50$, $n = 0.5$; (*c*), (*g*) $Re = 10$, $n = 1$; (*d*), (*h*) $Re = 50$, $n = 1$

Fig. 6. Comparison of the streamline distributions presented in [22] (*a, b, c, d*) and current work (*e, f, g, h*) at $\beta = 4$: (*a*), (*e*) $Re = 10$, $n = 0.5$; (*b*), (*f*) $Re = 50$, $n = 0.5$; (*c*), (*g*) $Re = 10$, $n = 1$; and (*d*), (*h*) $Re = 50$, $n = 1$

Значения коэффициента местного сопротивления были получены с использованием двух формул (5) и (6). Результаты расчетов в зависимости от числа Рейнольдса для псевдопластичной ($n = 0.8$), ньютоновской ($n = 1.0$) и дилатантной ($n = 1.2$) жидкостей при $\beta = 2$ представлены в табл. 3.

Таблица 3

	Re	0.1	1	5	10	20	50	100
$n = 0.8$	$C_M (5)$	107.747	10.791	2.222	1.202	0.699	0.390	0.313
	$C_M (6)$	110.616	11.076	2.256	1.202	0.692	0.383	0.294
$n = 1.0$	$C_M (5)$	134.984	13.516	2.788	1.478	0.853	0.474	0.391
	$C_M (6)$	138.726	13.880	2.843	1.506	0.862	0.485	0.375
$n = 1.2$	$C_M (5)$	168.389	16.859	3.450	1.821	1.037	0.583	0.476
	$C_M (6)$	172.962	17.320	3.531	1.853	1.051	0.591	0.460

Сравнение показало, что в рассматриваемом диапазоне чисел Рейнольдса максимальное отличие значений местного гидравлического сопротивления, вычисленных по двум различным формулам, не превышает 6.5 %. Для дальнейших расчетов C_M использовалась формула (5).

На величину коэффициента местного сопротивления значительное влияние оказывают геометрические характеристики области течения, показатель нелинейности реологической модели жидкости и число Рейнольдса. В результате параметрических расчетов выявлено, что увеличение степени сужения трубы способствует росту C_M до некоторого предельного значения, которое достигается при больших β (рис. 7, *a*). Изменение n от 0.5 до 1.5 приводит к монотонному увеличению C_M (рис. 7, *b*). Рост значений числа Re приводит к падению местных потерь давления в связи с уменьшением размеров области циркуляционного движения и зоны двумерного течения перед уступом (рис. 7, *c*).

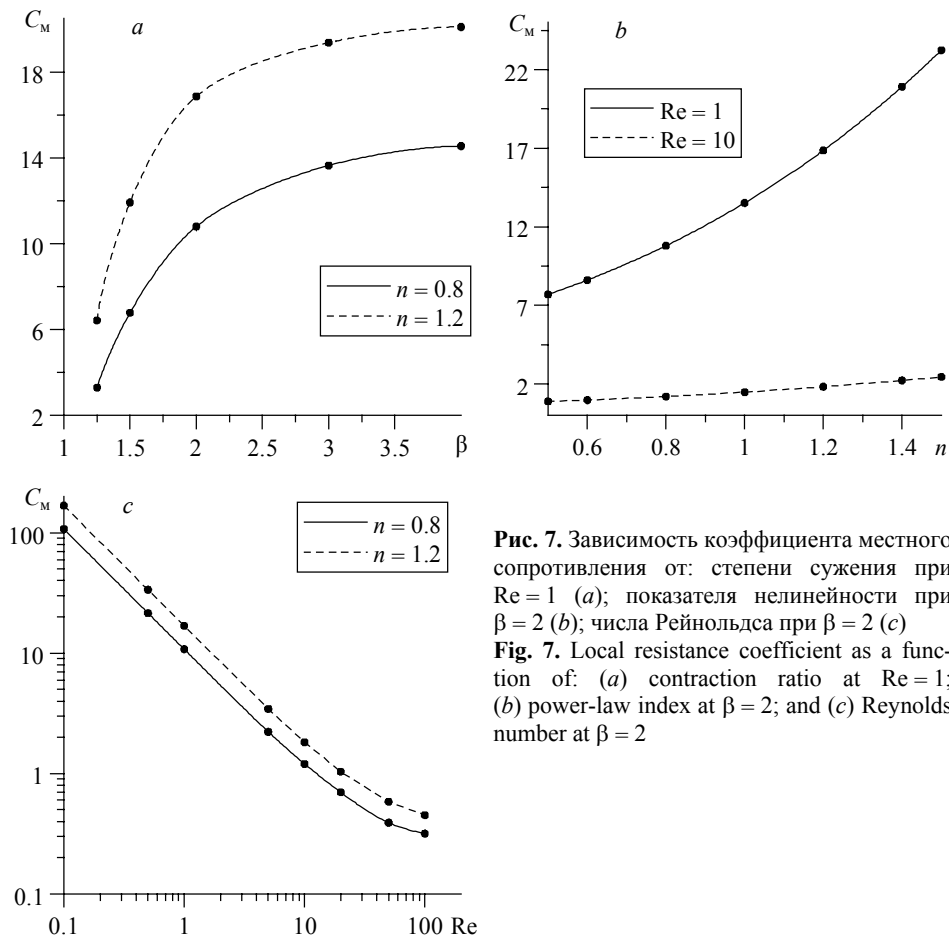


Рис. 7. Зависимость коэффициента местного сопротивления от: степени сужения при $Re = 1$ (*a*); показателя нелинейности при $\beta = 2$ (*b*); числа Рейнольдса при $\beta = 2$ (*c*)

Fig. 7. Local resistance coefficient as a function of: (a) contraction ratio at $Re = 1$; (b) power-law index at $\beta = 2$; and (c) Reynolds number at $\beta = 2$

С целью верификации расчётных данных проводится сравнение с результатами, полученными другими исследователями. На рисунке 8, *a* демонстрируется распределение аксиальной скорости, формируемое в скачке сечения при различных значениях числа Рейнольдса ($Re = 10, 30, 100$) в случае $\beta = 2, n = 1$. Сравнение результатов расчетов с данными работы [23] показало удовлетворительное согласование. Зависимость коэффициента местного сопротивления от числа Рейнольдса подтверждает аналогичную зависимость из работы [15] при $\beta = 4.558, n = 1$ (рис. 8, *b*).

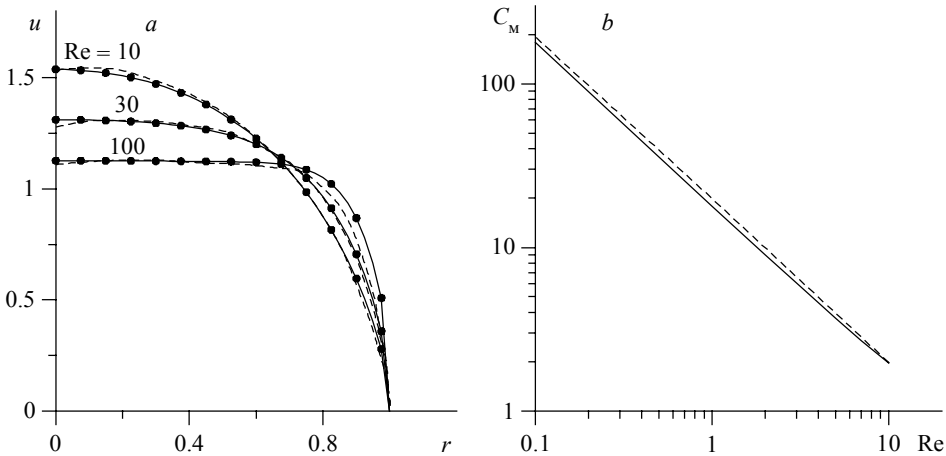


Рис. 8. Сравнение результатов: (а) профиль аксиальной скорости в скачке сечения при различных Re для $\beta = 2, n = 1$: - - - - расчеты из [23], ●●● – расчеты из данной работы; (б) коэффициент местного сопротивления в зависимости от Re при $\beta = 4.558, n = 1$: - - - - расчеты из [15], ——— – расчеты из данной работы

Fig. 8. Comparison of the results: (a) axial velocity profile at the contraction plane for various Re at $\beta = 2, n = 1$: - - - - calculated data from [23], ●●● – calculated data in the current work; (b) local resistance coefficient as a function of Re at $\beta = 4.558, n = 1$: - - - - calculated data from [15], ——— – calculated data in the current work

В табл. 4 представлено сравнение результатов расчетов C_m для $\beta = 2.6, n = 0.75, 1.00, 1.25$ в диапазоне $1 \leq Re \leq 100$ с данными из работы [24]. Следует отметить, что для выполнения сравнения результатов в эквивалентных условиях необходимо учитывать различие масштабных величин для вычисления числа Рейнольдса в [24] и в настоящей работе. Наблюдается хорошее согласование значений коэффициента местного сопротивления.

Таблица 4

Re	C_m					
	$n = 0.75$		$n = 1.00$		$n = 1.25$	
	Формула (5)	Работа [24]	Формула (5)	Работа [24]	Формула (5)	Работа [24]
1	12.659	12.827	16.152	16.570	20.708	21.540
5	2.631	2.741	3.328	3.530	4.238	4.564
10	1.450	1.481	1.777	1.900	2.236	2.442
20	0.860	0.850	1.029	1.085	1.277	1.381
50	0.508	0.472	0.588	0.596	0.741	0.744
100	0.323	0.346	0.424	0.433	0.554	0.532

Заключение

Получено численное решение задачи о ламинарном стационарном течении степенной жидкости в трубе со скачком сечения в виде сужения. Восстановлены картины течения псевдопластичной и дилатантной жидкостей. Проведены параметрические исследования геометрических характеристик структуры потока в зависимости от числа Рейнольдса ($0.1 \leq Re \leq 100$), степени сужения трубы ($1.25 \leq \beta \leq 4$) и показателя нелинейности жидкости ($0.5 \leq n \leq 1.5$). Продемонстрированы ре-

зультаты применения двух способов расчета коэффициента местного сопротивления. Построены зависимости местных потерь давления от определяющих параметров задачи. Приведены результаты сравнения полученных данных с данными других авторов.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Astarita G., Greco G.* Excess pressure drop in laminar flow through sudden contraction. Non-Newtonian liquids // *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*. 1968. V. 7. No. 4. P. 595–598.
2. *Rama Murthy A.V., Boger D.V.* Developing velocity profiles on the downstream side of a contraction for inelastic polymer solutions // *Transactions of the Society of Rheology*. 1971. V. 15. Iss. 4. P. 709–730.
3. *Kestin J., Sokolov M., Wakeham W.* Theory of capillary viscometers // *Applied Scientific Research*. 1973. V. 27. Iss. 1. P. 241–264.
4. *Walters K., Webster M.F.* The distinctive CFD challenges of computational rheology // *Int. J. Numer. Meth. Fluids*. 2003. V. 43. P. 577–596.
5. *Mitsoulis E., Vlachopoulos J.* Effect of Reynolds number in laminar flow through a sudden planar contraction // *AIChE Journal*. 1985. V. 31. No. 10. P. 1736–1739.
6. *Huaxiong Huang, Seymour B.R.* A finite difference method for flow in a constricted channel // *Computers & Fluids*. 1995. V. 24. No. 2. P. 153–160.
7. *Luo X.-L.* A control volume approach for integral viscoelastic models and its application to contraction flow of polymer melts // *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 1996. V. 64. Iss. 2–3. P. 173–189.
8. *Alves M.A., Pinho F.T., Oliveira P.J.* Effect of a high-resolution differencing scheme on finite-volume predictions of viscoelastic flows // *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* 2000. V. 93. P. 287–314.
9. *Dennis S.C.R., Smith F.T.* Steady flow through a channel with a symmetrical constriction in the form of a step // *Proc. R. Soc. Lond. A*. 1980. V. 372. P. 393–414.
10. *Chiang T.P., Sheu T.W.H., Hwang R.R.* Numerical studies of a three-dimensional flow in suddenly contracted channels // *Physics of Fluids*. 2002. V. 14. No. 5. P. 1601–1616.
11. *Lee Keegan F.* Experimental investigation into non-Newtonian fluid flow through gradual contraction geometries: Thesis. University of Liverpool, 2009. 160 p.
12. *Борзенко Е.И., Рыльцева К.Е., Фролов О.Ю., Шрагер Г.Р.* Расчет коэффициента местного сопротивления для течения вязкой несжимаемой жидкости в трубе с внезапным сужением // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2017. № 48. С. 36–48.
13. *Gupta M., Hieber C.A., Wang K.K.* Entrance effects for power-law fluid // *Polymer Engineering and Science*. 1994. V. 34. No. 3. P. 209–212.
14. *Трегубов В.П., Жуков Н.К.* Компьютерное моделирование потока крови при наличии сосудистых патологий // *Российский журнал биомеханики*. 2017. Т. 21. № 2. С. 201–210.
15. *Pienaar V.G.* Viscous flow through sudden contractions / Dis. Cape Peninsula University of Technology, 2004. 198 p.
16. *Годунов С.К., Рябенький В.С.* Разностные схемы. М.: Наука, 1977. 440 с.
17. *Самарский А.А.* Введение в теорию разностных схем. М.: Наука, 1971. 553 с.
18. *Шрагер Г.Р., Козлобродов А.Н., Якутенок В.А.* Моделирование гидродинамических процессов в технологии переработки полимерных материалов. Томск: Изд-во Том. ун-та, 1999. 230 с.
19. *Идельчик И.Е.* Справочник по гидравлическим сопротивлениям / под ред. М.О. Штейнберга. 3-е изд. М.: Машиностроение, 1992. 672 с.
20. *Tiu C., Boger D.V., Halmos A.L.* Generalized method for predicting loss coefficients in entrance region flows for inelastic fluids // *The Chemical Engineering Journal*. 1972. V. 4. Iss. 2. P. 113–117.

21. Кочин Н.Е., Кибель И.А., Розе Н.В. Теоретическая гидромеханика. Ч. 2. 4-е изд. М.: Физматлит, 1963. 728 с.
22. Kfuri S.L.D., Silva J.Q., Soares E.J., Thompson R.L. Friction losses for power-law and viscoplastic materials in an entrance of a tube and an abrupt contraction // J. Petroleum Science and Engineering. 2011. V. 76. Iss. 3–4. P. 224–235.
23. 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 Mechanics. 1983. V. 13. P. 341–363.
24. Kfuri S.L.D., Soares E.J., Thompson R.L., Siqueira R.N. Friction coefficients for Bingham and power-law fluids in abrupt contractions and expansions // J. Fluids Engineering. 2017. V. 139(2). P. 1–8.

Статья поступила 25.10.18 г.

Borzenko E.I., Ryltseva K.E., Shrager G.R. (2019) NUMERICAL INVESTIGATION OF NON-NEWTONIAN FLUID FLOW THROUGH A PIPE SUDDEN CONTRACTION. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 58. pp. 56–70

DOI 10.17223/19988621/58/5

Keywords: sudden contraction, non-Newtonian fluid, power-law model, sweep method, flow kinematic characteristics, Reynolds number, local resistance.

Sudden contraction represents a geometrical heterogeneity leading to the significant flow structure changes and intensifying energy losses. The fluid flowing through a sudden contraction is of great scientific interest as it is found to be an intermediate stage of the processes taking place in a technical equipment such as pumps, engines, reactors, etc.

In this paper, the problem of a laminar stationary flow of non-Newtonian fluid in a pipe with sudden contraction was numerically solved. The fluid rheological properties were described by the Ostwald-de Waele power law. The constitutive equations were written using the stream function and vorticity variables in a cylindrical coordinate system. The asymptotic time solution to the unsteady flow equations was obtained in order to derive a steady-state solution to the initial problem. The main equations were discretized using the finite-difference method based on the alternative directions scheme and solved using the sweep method. To verify numerical algorithm developed, the approximating convergence was tested on the sequence of square grids.

According to the flow patterns, pseudoplastic and dilatant fluid flow structures both consist of one-dimensional zones next to the inlet and outlet sections and two-dimensional zones in the vicinity of contraction plane. To evaluate the impact of the Reynolds number, pipe contraction ratio, and power-law index on the length of two-dimensional flow regions, the dependency diagrams were plotted in a wide range of the parameters. Two different methods were used to calculate the local resistance coefficient. The obtained values were found to be in a good agreement. A parametric study was performed to reveal the influence of the governing parameters on the local energy losses.

Financial support. The research is implemented at the expanses of the Russian Science Foundation (project No. 18-19-00021).

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

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

REFERENCES

1. Astarita G., Greco G. (1968) Excess pressure drop in laminar flow through sudden contraction. Non-Newtonian liquids. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*. 7(4). pp. 595–598. DOI: 10.1021/i160025a005.
2. Rama Murthy A.V., Boger D.V. (1971) Developing velocity profiles on the downstream side of a contraction for inelastic polymer solutions. *Transactions of the Society of Rheology*. 15(4). pp. 709–730. DOI: 10.1122/1.549239.
3. Kestin J., Sokolov M., Wakeham W. (1973) Theory of capillary viscometers. *Applied Scientific Research*. 27(1). pp. 241–264. DOI: 10.1007/BF00382489.
4. Walters K., Webster M.F. (2003) The distinctive CFD challenges of computational rheology. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. 43. pp. 577–596. DOI: 10.1002/flid.522.
5. Mitsoulis E., Vlachopoulos J. (1985) Effect of Reynolds number in laminar flow through a sudden planar contraction. *AIChE Journal*. 31(10). pp. 1736–1739. DOI: 10.1002/aic.690311020.
6. Huaxiong Huang, Seymour B.R. (1995) A finite difference method for flow in a constricted channel. *Computers & Fluids*. 24(2). pp. 153–160. DOI: 10.1016/0045-7930(94)00022-Q.
7. Luo X.-L. (1996) A control volume approach for integral viscoelastic models and its application to contraction flow of polymer melts. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. 64(2–3). pp. 173–189. DOI: 10.1016/0377-0257(96)01428-0.
8. Alves M.A., Pinho F.T., Oliveira P.J. (2000) Effect of a high-resolution differencing scheme on finite-volume predictions of viscoelastic flows. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. 93. pp. 287–314. DOI: 10.1016/S0377-0257(00)00121-X.
9. Dennis S.C.R., Smith F.T. (1980) Steady flow through a channel with a symmetrical constriction in the form of a step. *Proceedings of the Royal Society of London. A*. 372. pp. 393–414. DOI: 10.1098/rspa.1980.0119.
10. Chiang T.P., Sheu T.W.H., Hwang R.R. (2002) Numerical studies of a three-dimensional flow in suddenly contracted channels. *Physics of Fluids*. 14(5). pp. 1601–1616. DOI: 10.1063/1.1459719.
11. Lee Keegan F. (2009) *Experimental Investigation into Non-Newtonian Fluid Flow through Gradual Contraction Geometries: Thesis*. University of Liverpool.
12. Borzenko E.I., Ryltseva K.E., Frolov O.Yu., Shrager G.R. (2017) Raschet koefitsienta mestnogo soprotivleniya dlya techeniya vyazkoy neshzhimaemoy zhidkosti v trube s vnezapnym suzheniem [Calculation of the local resistance coefficient of viscous incompressible fluid flow in a pipe with sudden contraction]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 48. pp. 36–48. DOI: 10.17223/19988621/48/4.
13. Gupta M., Hieber C.A., Wang K.K. (1994) Entrance effects for power-law fluid. *Polymer Engineering and Science*. 34(3). pp. 209–212. DOI: 10.1002/pen.760340306.
14. Tregubov V.P., Zhukov N.K. (2017) Komp'yuternoe modelirovanie potoka krovi pri nalichii sosudistyykh patologiy [Computer simulation of the blood stream with availability of vessel pathologies]. *Russian Journal of Biomechanics*. 21(2). pp. 201–210. DOI: 10.15593/RZhBiomeh/2017.2.07.
15. Pienaar V.G. (2004) *Viscous flow through sudden contractions. Dissertation*. Cape Peninsula University of Technology.
16. Godunov S.K., Ryabenkiy V.S. (1977) *Raznostnye skhemy* [Difference Schemes]. Moscow: Nauka.
17. Samarskiy A.A. (1971) *Vvedenie v teoriyu raznostnykh skhem* [Introduction into the theory of difference schemes]. Moscow: Nauka.
18. Shrager G.R., Kozlobrodov A.N., Yakutenok V.A. (1999) *Modelirovanie gidrodinamicheskikh protsessov v tekhnologii pererabotki polimernykh materialov* [Fluid Dynamic Simulations in Polymer Processing]. Tomsk: Tomsk Univ. Publ.
19. Idel'chik I.E. (1966) *Handbook of Hydraulic Resistance*. Jerusalem: Israel Program for Scientific Translations.

20. Tiu C., Boger D.V., Halmos A.L. (1972) Generalized method for predicting loss coefficients in entrance region flows for inelastic fluids. *The Chemical Engineering Journal*. 4(2). pp. 113–117. DOI: 10.1016/0300-9467(72)80003-0.
21. Kochin N.E., Kibel' I.A., Roze N.V. (1964) *Theoretical Hydromechanics*. English translation of 5th Russian ed. New York: Wiley.
22. Kfuri S.L.D., Silva J.Q., Soares E.J., Thompson R.L. (2011) Friction losses for power-law and viscoplastic materials in an entrance of a tube and an abrupt contraction. *Journal of Petroleum Science and Engineering*. 76(3–4). pp. 224–235. DOI: 10.1016/j.petrol.2011.01.002.
23. 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. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. 13. pp. 341–363. DOI: 10.1016/0377-0257(83)80028-7.
24. Kfuri S.L.D., Soares E.J., Thompson R.L., Siqueira R.N. (2017) Friction coefficients for Bingham and power-law fluids in abrupt contractions and expansions. *Journal of Fluids Engineering*. 139(2). pp. 1–8. DOI: 10.1115/1.4034521.

Received: October 25, 2018

УДК 532.542

DOI 10.17223/19988621/58/6

О.А. Дьякова, О.Ю. Фролов

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОГО ПОТОКА
СТЕПЕННОЙ ЖИДКОСТИ В L-ОБРАЗНОМ КАНАЛЕ¹**

Построена математическая модель течения степенной жидкости в плоском L-образном канале в неизотермических условиях. Реализовано численное решение сформулированной задачи. Представлены результаты расчета кинематических характеристик потока при разных значениях степени нелинейности жидкости, чисел Рейнольдса и Бринкмана. Проведено сравнение картины течения ньютоновской жидкости с численными и экспериментальными данными работ других авторов.

Ключевые слова: *течение, вязкая жидкость, неньютоновская жидкость, L-образный канал, диссипативный разогрев, численное моделирование, кинематика.*

Исследования течений жидкостей представляют интерес как для инженеров и научных работников, так и для разработчиков и производителей технологического оборудования. В металлургии, пищевой, химической промышленности и т. п. является актуальной задача создания средств математического моделирования гидродинамических и теплофизических процессов, сопровождающих переработку жидкостей со сложными реологическими свойствами. Транспортировка жидких сред осуществляется в трубопроводах с различными конструктивными элементами, включая изогнутые каналы, каналы с сужением, расширением, краны, клапаны и т. д. [1, 2]. Во многих случаях при математическом описании течений необходимо учитывать неизотермичность и неньютоновские свойства среды [3, 4].

Исследования структуры ламинарных неизотермических потоков ньютоновской жидкости в каналах с изменением направления течения представлены в обзорах [1, 5]. Профили скорости в различных сечениях области поворота потока представлены в [6]. В [7–10] приводятся результаты исследований установившегося движения несжимаемой жидкости в каналах квадратного сечения в зависимости от значений числа Рейнольдса и степени кривизны колена. В [11] авторами решается трехмерная задача об установившемся течении ньютоновской жидкости методом конечных элементов, проводится сравнение с экспериментальными данными. Исследование условий взаимодействия вязкой жидкости с твердой стенкой, описывающих прилипание, проскальзывание по закону Навье и проскальзывание с предельным напряжением проводилось авторами [12]. В результате расчетов получены картины установившегося течения с образованием циркуляционных зон вблизи угловых точек. Количество работ, посвященных анализу течений неньютоновских жидкостей в каналах с L-образной геометрией, ограничено, причем в основном используются модели вязкоупругих сред [13–18].

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (проект № 18-38-00259).

Целью работы является исследование неізотермического течения степенной жидкости в плоском L-образном канале с учетом вязкой диссипации и зависимости консистенции от температуры.

Математическая постановка задачи

Рассматривается стационарное неізотермическое течение степенной несжимаемой жидкости в L-образном канале. Математическую основу описания течения образуют уравнения движения, неразрывности и энергии, записанные в безразмерных переменных в декартовой системе координат. Реологическое поведение жидкости описывается законом Освальда де Вилля с экспоненциальной зависимостью консистенции от температуры. Система уравнений имеет вид

$$\operatorname{Re}(\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} = -\nabla p + \nabla \cdot (2B\mathbf{E}); \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0; \quad (2)$$

$$\operatorname{Pe}(\mathbf{V} \cdot \nabla) \theta = \Delta \theta + \operatorname{Br} \cdot B \cdot A^2; \quad (3)$$

$$B = e^{-\theta} \cdot A^{n-1}. \quad (4)$$

Здесь $\mathbf{V} = \{u, v\}$ – вектор скорости; p – давление; $\theta = \beta(T - T_0)$ – температура; $A = (2e_{ij}e_{ji})^{1/2}$ – интенсивность тензора скоростей деформации $\mathbf{E}$; T, T_0 – размерные температуры жидкости в потоке и на твердой стенке соответственно; $\operatorname{Re} = \rho U^{2-n} L^n / k_0$ – число Рейнольдса; $\operatorname{Pe} = c \rho U L / \lambda$ – число Пекле; $\operatorname{Br} = k_0 U^{n+1} \beta / (L^{n-1} \lambda)$ – число Бринкмана; c – теплоемкость; λ – коэффициент теплопроводности; ρ – плотность; $k_0 = k_1 \exp(-\beta(T_0 - T_1))$ – консистенция при температуре T_0 ; n, k_1, β, T_1 – параметры реологического закона. В качестве масштабов обезразмеривания выбраны следующие величины: длины – L , скорости – U , давления – $k_0(U/L)^n$, где L – ширина канала, U – среднерасходная скорость во входном сечении.

Область решения показана на рис. 1.

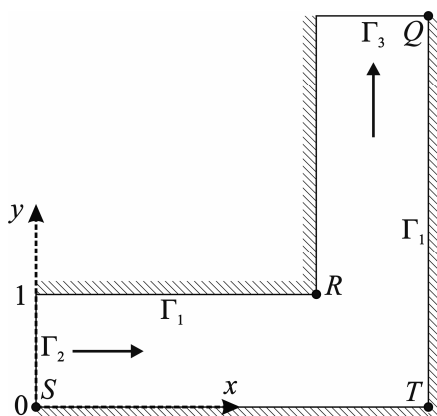


Рис. 1. Область решения

Fig. 1. Solution domain

Жидкость подается через входное сечение Γ_2 с постоянным расходом, равным единице. Для задания профилей скорости и температуры во входном сечении решается задача одномерного стационарного течения неньютоновской несжимаемой жидкости с учетом диссипативного разогрева и экспоненциальной зависимости консистенции от температуры в плоском бесконечном канале с заданным расходом. Система уравнений, описывающих течение, в безразмерных переменных имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y} \left(B \frac{\partial u}{\partial y} \right) &= \delta, \\ \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + \text{Br} \cdot B \cdot \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2 &= 0, \\ B &= e^{-\theta \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right|^{n-1}}, \end{aligned} \quad (5)$$

где $\delta = \frac{L}{k_0} \frac{\partial p}{\partial x} \left(\frac{L}{U} \right)^n$ – безразмерный перепад давления на единицу длины. Величина δ выбирается такой, чтобы объемный расход жидкости через единицу площади равнялся единице.

Граничные условия одномерного течения записываются следующим образом:

$$y = 0, y = 1: u = 0, \theta = 0. \quad (6)$$

Система уравнений (5) с граничными условиями (6) решается численно [19] с использованием конечно-разностного метода и метода прогонки.

На твердых стенках Γ_1 выполняются условия прилипания и температура равна нулю. В выходном сечении Γ_3 для продольной скорости и температуры выполняются мягкие граничные условия, поперечная скорость равна нулю. Входная и выходная границы находятся на достаточном удалении от колена во избежание влияния последнего на характер течения в окрестности Γ_2 и Γ_3 .

Метод решения

Для получения стационарного решения сформулированной задачи (1) – (4) с соответствующими граничными условиями используется метод установления. Последующее решение уравнений с нестационарными слагаемыми осуществляется конечно-разностным методом контрольного объема с использованием разнесенной разностной сетки. В рамках одного итерационного цикла используется процедура SIMPLE [20], которая предусматривает расчет поля скорости с фиксированным полем давления и последующую коррекцию скоростей и давления с целью удовлетворения уравнения неразрывности. Уравнения движения аппроксимируются с применением экспоненциальной схемы, а уравнение энергии – с привлечением схемы против потока для аппроксимации конвективных слагаемых.

Для тестирования численной методики были проведены расчеты на последовательности сеток. В табл. 1, а представлены значения продольной скорости v^* и температуры θ^* в центре выходного сечения в зависимости от шага сетки, демонстрирующие аппроксимационную сходимость.

Количественное подтверждение аппроксимационной сходимости приведено в табл. 1, б, где показаны значения относительных ошибок, рассчитанных по сле-

дующим формулам:

$$E_v = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \left[\frac{|u_i^{\text{BX}} - v_i^{\text{ВЫХ}}|}{u_i^{\text{BX}}} \right] \cdot 100 \%,$$

$$E_\theta = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^{N-1} \left[\frac{|\theta_i^{\text{BX}} - \theta_i^{\text{ВЫХ}}|}{\theta_i^{\text{BX}}} \right] \cdot 100 \%, \quad (5)$$

где: u_i^{BX} , θ_i^{BX} – поперечная скорость и температура на входной границе Γ_2 ; $v_i^{\text{ВЫХ}}$, $\theta_i^{\text{ВЫХ}}$ – продольная скорость и температура в выходном сечении Γ_3 , полученные с использованием численной методики; i – номер узла расчетной сетки, $i = 0$, N – узлы на твердой стенке.

Таблица 1 а

Аппроксимационная сходимость при $Re = 0.01$, $Pe = 100$, $n = 0.8$, $Br = 0.5$

Шаг сетки	v^*	θ^*
1/10	1.4672	0.2658
1/20	1.4774	0.2730
1/40	1.4821	0.2764
1/80	1.4856	0.2773

Таблица 1 б

Аппроксимационная сходимость при $Re = 0.01$, $Pe = 100$, $n = 0.8$, $Br = 0.5$

Шаг сетки	$E_v, \%$	$E_\theta, \%$
1/10	1.5836	5.6620
1/20	1.6749	3.8440
1/40	1.3934	2.9814
1/80	0.9897	2.3480

Все дальнейшие расчеты проводились с использованием шага сетки 1/80.

Результаты расчетов

На рис. 2 показаны картины течения псевдопластичной жидкости ($n < 1$) в виде распределений линий тока в зависимости от значений числа Рейнольдса при $Pe = 100$, $Br = 0.5$. При числах Рейнольдса, равных 0.1 и 1 (рис. 2, а и б), в окрестности угловой точки T (рис. 1) формируется практически застойная зона. По мере увеличения числа Рейнольдса формируется циркуляционная зона, которая становится заметной при $Re = 20$ (рис. 2, в). При дальнейшем усилении инерционного эффекта появляется вторая циркуляционная зона в окрестности точки R (рис. 1 и 2, д), размер которой значительно увеличивается при $Re = 120$ (рис. 2, ф).

В ходе численных расчетов было установлено, что изменение числа Пекле в диапазоне $100 \leq Pe \leq 5000$ оказывает незначительное влияние на структуру потока.

Рис. 3 демонстрирует изменение картины течения при переходе от псевдопластичных свойств жидкости к дилатантным ($n > 1$) при $Pe = 100$, $Br = 0.5$. При $Re = 1$ незначительно увеличивается размер циркуляционной зоны в углу канала (рис. 3, а–с). При $Re = 50$ размеры циркуляционной зоны в окрестности точки R (рис. 1, рис. 3, д–ф) уменьшаются на порядок.

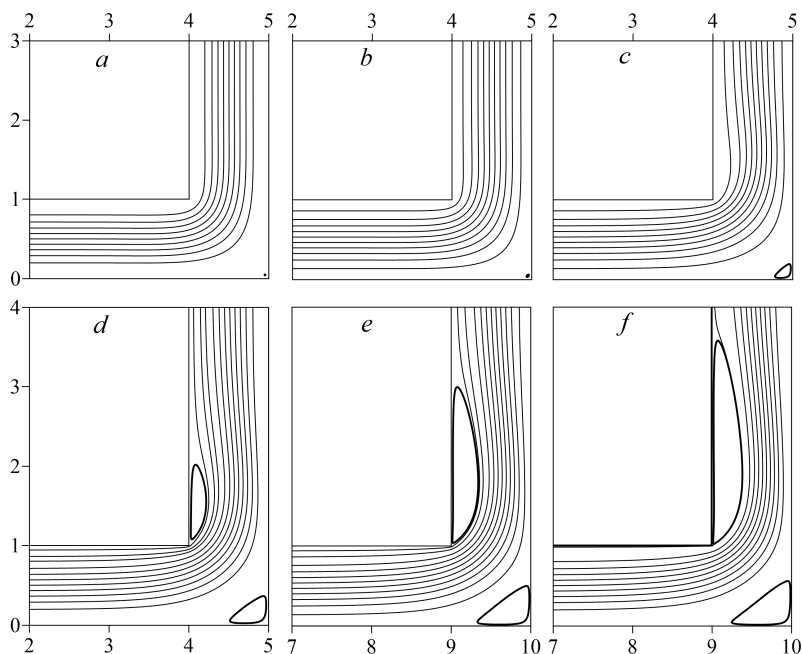


Рис. 2. Линии тока при $n = 0.8$, $Pe = 100$, $Br = 0.5$:

$a - Re = 0.1$; $b - Re = 1$; $c - Re = 20$; $d - Re = 50$; $e - Re = 90$; $f - Re = 120$

Fig. 2. Streamlines at $n = 0.8$, $Pe = 100$, and $Br = 0.5$:

$Re = (a) 0.1$, $(b) 1$, $(c) 20$, $(d) 50$, $(e) 90$, and $(f) 120$

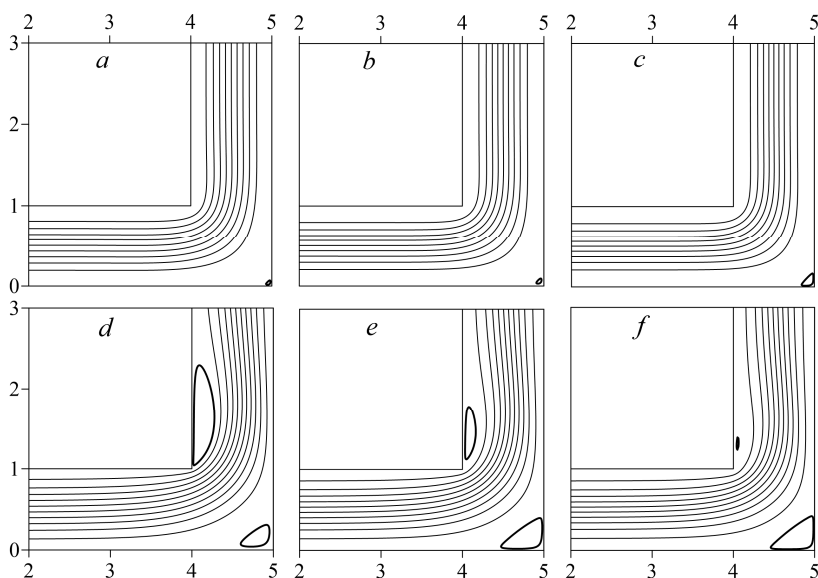


Рис. 3. Линии тока при $Pe = 100$, $Br = 0.5$, $Re = 1$ ($a-c$) и $Re = 50$ ($d-f$):

$a, d - n = 0.6$; $b, e - n = 1$; $c, f - n = 1.4$

Fig. 3. Streamlines at $Pe = 100$, $Br = 0.5$, $Re = (a-c) 1$ and $(d-f) 50$:

$n = (a, d) 0.6$, $(b, e) 1$, and $(c, f) 1.4$

На рис. 4 показано влияние числа Бринкмана на картину течения псевдопластичной жидкости при $Re = 50$, $Pe = 100$. Результаты расчетов для данного режима течения показывают, что увеличение интенсивности диссипации механической энергии жидкости в рассматриваемом диапазоне слабо влияет на структуру потока.

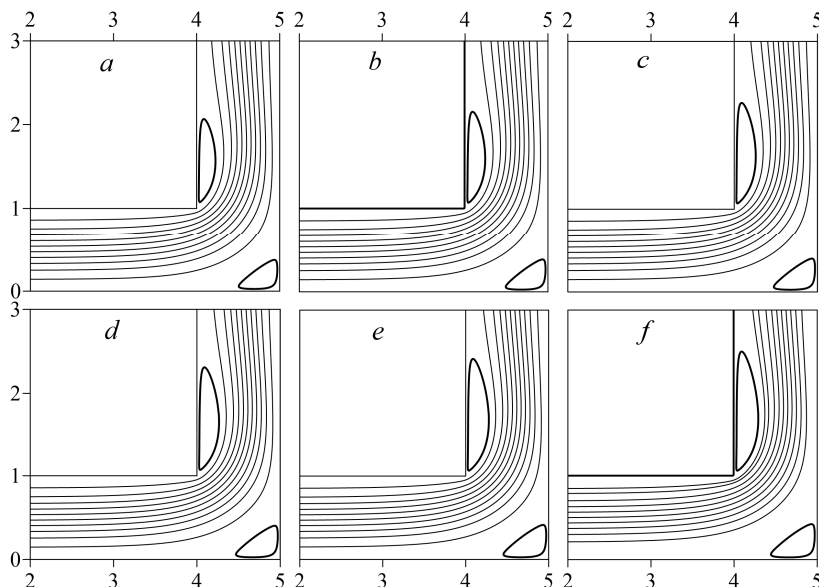


Рис. 4. Линии тока при $n = 0.8$, $Re = 50$, $Pe = 100$:

$a - Br = 0.6$; $b - Br = 0.8$; $c - Br = 1$; $d - Br = 1.1$; $e - Br = 1.3$; $f - Br = 1.5$

Fig. 4. Streamlines at $n = 0.8$, $Re = 50$, and $Pe = 100$:

$Br = (a) 0.6, (b) 0.8, (c) 1, (d) 1.1, (e) 1.3, \text{ and } (f) 1.5$

Зависимость размеров циркуляционных зон от определяющих безразмерных параметров задачи и степени нелинейности жидкости демонстрирует рис. 5. С ростом числа Рейнольдса размеры обеих циркуляционных зон в рассматриваемой области течения увеличиваются (рис. 5, a). Возможно, это связано с ростом значений эффективной вязкости псевдопластичной жидкости ($n < 1$) в областях малых значений интенсивности тензора скоростей деформации. Поперечные и продольные размеры циркуляционной зоны в окрестности точки T , а также поперечные размеры циркуляционной зоны в окрестности точки R с ростом числа Бринкмана меняются слабо (рис. 1 и 5, b). С ростом степени нелинейности жидкости размеры циркуляционной зоны в окрестности точки T канала стремятся к постоянной величине (рис. 1 и 5, c).

На рис. 6, $a-c$ показано влияние критериев подобия Re , Br и параметра реологической модели n на размер областей двумерного течения при прочих равных условиях. Области одномерного течения здесь будем называть расстояния от входной и выходной границ канала до сечений, в которых безразмерная продольная скорость отклоняется от решения одномерной задачи более чем на 1 %. Начиная с указанного сечения, фиксируются длины зон двумерного течения как расстояния h_1 и h_2 в сторону по потоку от входной границы Γ_2 и в сторону против потока от выходной границы Γ_3 соответственно до противоположных стенок канала, как показано на рис 6. Из полученных зависимостей видно, что для течения

псевдопластичной жидкости при $n = 0.8$, $Re = 100$ (рис. 6, *a* и *b*) размер зоны двумерного течения на участке *ST* (рис. 1) меньше, чем на участке *QT* (рис. 1) и с ростом чисел Рейнольдса и Бринкмана стремится к постоянному значению. При переходе свойств жидкости от псевдопластичной к дилатантной при $Re = 50$, $Pe = 100$ (рис. 6, *c*) длина зоны двумерного течения h_2 уменьшается, а значение h_1 возрастает.

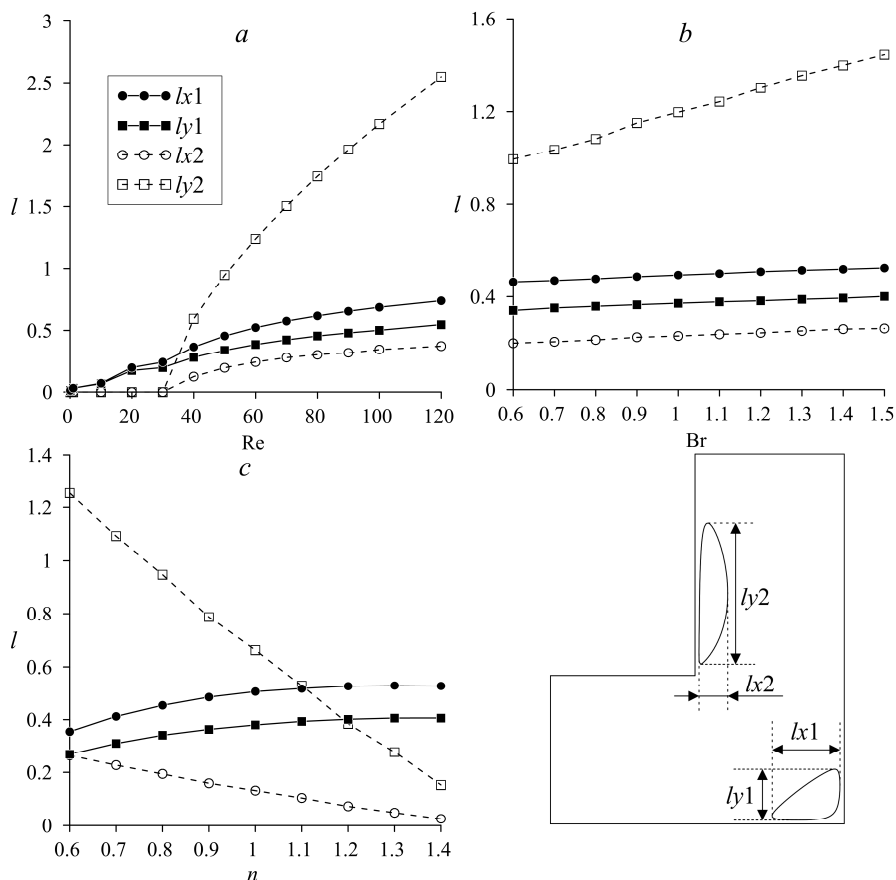


Рис. 5. Размеры циркуляционных зон при $Pe = 100$:

a – $n = 0.8$, $Br = 0.5$; *b* – $n = 0.8$, $Re = 50$; *c* – $Br = 0.5$, $Re = 50$

Fig. 5. The sizes of recirculation zones at $Pe = 100$:

(*a*) $n = 0.8$, $Br = 0.5$; (*b*) $n = 0.8$, $Re = 50$; and (*c*) $Br = 0.5$, $Re = 50$

На рис. 7 показано сравнение картины течения в области внутреннего и внешнего углов плоского канала при $n = 1$ и $Re = 48$ в изотермическом приближении (сплошные линии) с расчетными данными [10] (пунктирные линии). В [10] с помощью конечно-разностного метода решаются уравнения в переменных функции тока – вихрь, описывающих стационарное ламинарное движение ньютоновской жидкости. Наблюдается качественное и количественное согласование результатов по размерам и местоположению циркуляционных зон.

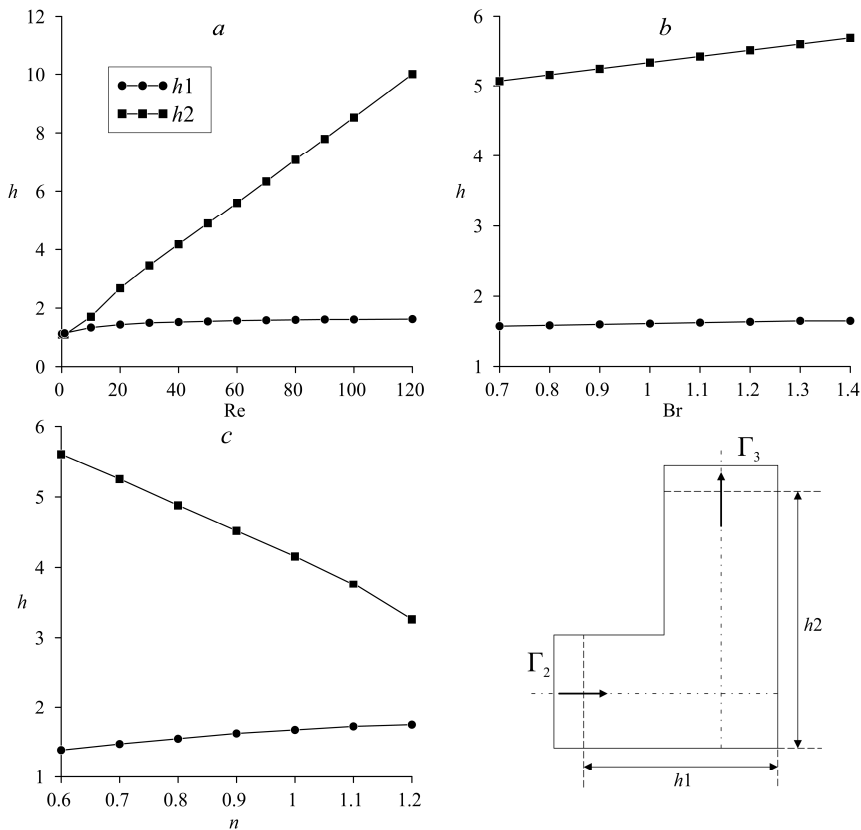


Рис. 6. Размеры областей двумерного течения при $Pe = 100$:
 $a - n = 0.8, Br = 0.5$; $b - n = 0.8, Re = 50$; $c - Br = 0.5, Re = 50$

Fig. 6. The sizes of two-dimensional flow regions at $Pe = 100$:
(a) $n = 0.8, Br = 0.5$; (b) $n = 0.8, Re = 50$; and (c) $Br = 0.5, Re = 50$

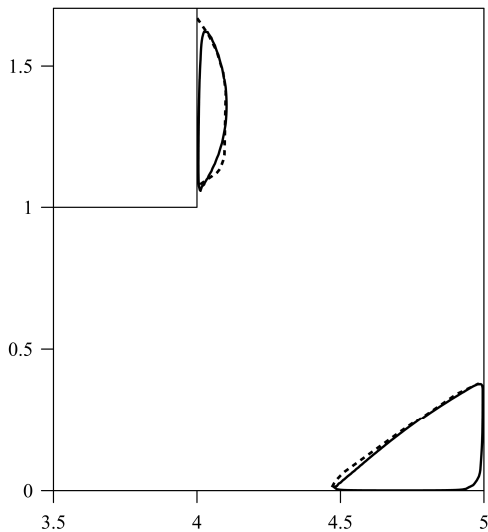


Рис. 7. Картина течения при $n = 1, Re = 48, Br = 0$ (пунктир – данные [10])
Fig. 7. Flow pattern at $n = 1, Re = 48, Br = 0$ (the dashed line indicates the data from [10])

На рис. 8, *a–d* показаны компоненты вектора скорости дилатантной жидкости при $Re = 100$, $Br = 0.5$ для двух чисел Рейнольдса. Изменение числа Re от 0.1 до 50 приводит к возрастанию поперечных и продольных скоростей в областях перестроения потока жидкости и к возникновению циркуляционных зон.

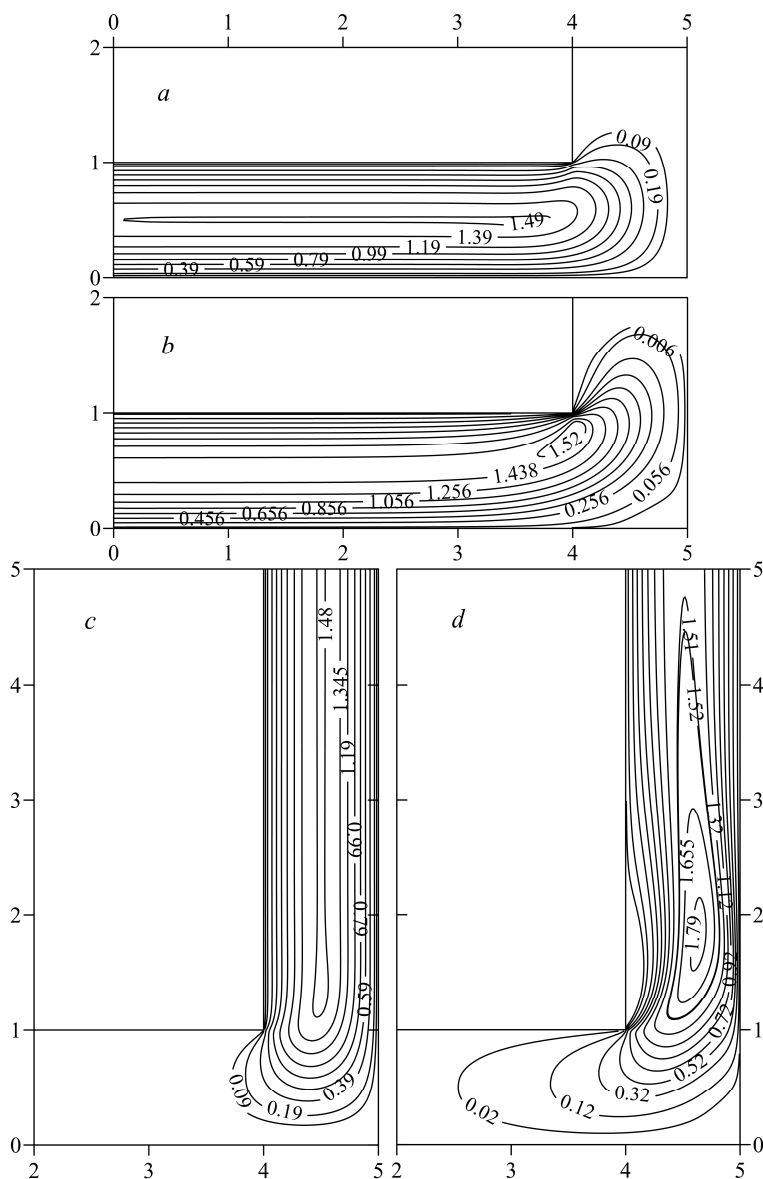


Рис. 8. Поле скорости u (*a, b*) и v (*c, d*) при $n = 0.8$, $Pe = 100$, $Br = 0.5$:
a, c – $Re = 0.1$; *b, d* – $Re = 50$

Fig. 8. Velocity field of u (*a, b*) and v (*c, d*) at $n = 0.8$, $Pe = 100$, and $Br = 0.5$:
 $Re = (a, c) 0.1$ and $(b, d) 50$

На рис. 9, *a* и *b* показаны распределения безразмерных компонент вектора скорости в окрестности точки *R* (см. рис. 1) при движении ньютоновской жидкости с числом Рейнольдса равным 4, которые сравниваются с экспериментальными данными [14] визуализации потока жидкости в L-образном канале прямоугольного сечения. В [14] при проведении эксперимента в качестве ньютоновской жидкости использовался водный раствор сиропа мальтозы, а измерения проводились с помощью лазерного доплеровского анемометра. Рис. 9, *a* и *b* демонстрируют удовлетворительное согласование результатов.

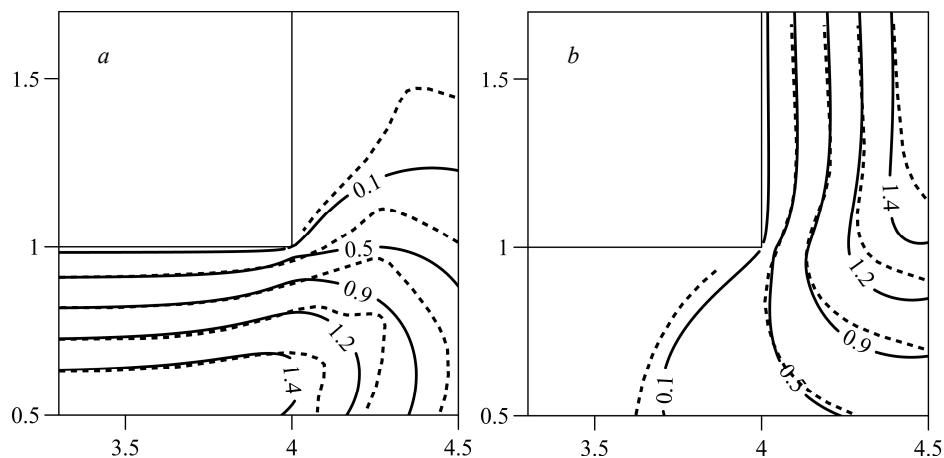


Рис. 9. Поле скорости u (*a*) и v (*b*) при $n = 1$, $Re = 4$, $Br = 0$
(пунктир – данные [14])

Fig. 9. Velocity field of u (*a*) and v (*b*) at $n = 1$, $Re = 4$, and $Br = 0$
(the dashed line indicates the data from [14])

Заключение

В результате проведенного исследования показано влияние числа Рейнольдса на размеры циркуляционных зон в окрестности внутреннего и внешнего углов L-канала для стационарного движения степенной жидкости. Было установлено, что изменение интенсивности диссипации механической энергии в потоке слабо меняет картину течения. Изменение параметра реологической модели n при переходе свойств жидкости от псевдопластичных к дилатантным показывает, что размеры циркуляционной зоны в области внутреннего угла канала стремятся к постоянной величине. Был проведен параметрический расчет размеров областей двумерного течения в зависимости от чисел Рейнольдса, Бринкмана и степени нелинейности жидкости. При $n < 1$ наблюдается рост указанных размеров при увеличении параметра Рейнольдса от 0.1 до 120 и росте числа Бринкмана от 0.7 до 1.4. Анализ результатов расчета показал, что с ростом n размер области двумерного течения перед поворотом потока увеличивается и стремится к постоянной величине, а после поворота – уменьшается. Для ньютоновской жидкости сравнение с численными и экспериментальными данными других авторов показывает согласование результатов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Naphon P., Wongwises S. A review of flow and heat transfer characteristics in curved tubes // Renewable and Sustainable Energy Reviews. 2006. V. 10(5). P. 463–490. DOI: 10.1016/j.rser.2004.09.014.
2. Ojha R.K., Joshi P.V. A Review of Fluid Flow and Heat Transfer Analysis on Curved Duct // Proc. All India Conference on «Intelligent systems» in Mechanical and Mechatronics Engineering. April 25–26, 2014. P. 5.156–5.159. DOI: 10.13140/2.1.1540.4166.
3. Раувендааль К. Экструзия полимеров. СПб.: Профессия, 2008. 768 с.
4. Фройштетер Г.Б., Данилевич С.Ю., Радионова Н.В. Течение и теплообмен неэютовских жидкостей в трубах. Киев: Наукова думка, 1990. 216 с.
5. Ghobadi M., Muzychka Y.S. A Review of Heat Transfer and Pressure Drop Correlations for Laminar Flow in Curved Circular Ducts // Heat Transfer Engineering. 2016. V. 37(10). P. 815–839. DOI: 10.1080/01457632.2015.1089735.
6. Soeberg H. Viscous flow in curved tubes—I. Velocity profiles // Chem. Eng. Sci. 1988. V. 43(4). P. 855–862. DOI: 10.1016/0009-2509(88)80081-2.
7. Winters K.H. A bifurcation study of laminar flow in a curved tube of rectangular cross-section // J. Fluid Mech. 1987. V. 180. P. 343–369. DOI: 10.1017/S0022112087001848.
8. Soh W.Y. Developing fluid flow in a curved duct of square cross-section and its fully developed dual solutions // J. Fluid Mech. 1988. V. 188. P. 337–361. DOI: 10.1017/S0022112088000758.
9. Bara B., Nandakumar K., Masliyah J.H. An experimental and numerical study of the Dean problem: flow development towards two-dimensional multiple solutions // J. Fluid Mech. 1992. V. 244. P. 339–376. DOI: 10.1017/S0022112092003100.
10. Kawaguti M. Numerical Study of the Flow of a Viscous Fluid in a Curved Channel // The Physics of Fluids. 1969. V. 12. P. II-101–II-104. DOI: 10.1063/1.1692420.
11. Tsai S.F., Sheu T.W.H. Numerical exploration of flow topology and vortex stability in a curved duct // Int. J. Numer. Meth. Engng. 2007. V. 71. P. 564–582. DOI: 10.1002/nme.1959.
12. Борзенко Е.И., Дзякова О.А., Шрагер Г.Р. Исследование явления проскальзывания в случае течения вязкой жидкости в изогнутом канале // Вестн Том. гос. ун-та. Математика и механика. 2014. № 2(28). С. 35–44.
13. Perera M.G.N., Walters K. Long-Range Memory Effects in Flows Involving Abrupt Changes in Geometry. Part I: Flows Associated With L-Shaped And T-Shaped Geometries // J. Non-newton. Fluid Mech. V. 2(1). P. 49–81. DOI: 10.1016/0377-0257(77)80032-3.
14. Cochrane T., Walters K., Webster M.F. Newtonian and non-Newtonian flow near a re-entrant corner // J. Nonnewton. Fluid Mech. 1982. V. 10(1-2). P. 95–114. DOI: 10.1016/0377-0257(82)85007-6.
15. Chono S., Iemoto Y. Generation of reverse flow of viscoelastic fluid upstream of re-entrant corner in two-dimensional L-shaped channel // J. Rheol. 1990. V. 34(3). P. 295–308. DOI: 10.1122/1.550130.
16. Chono S., Iemoto Y. Numerical simulation of viscoelastic flow in two-dimensional L-shaped channels // J. Rheol. 1992. V. 36(2). P. 335–356. DOI: 10.1122/1.550369.
17. Wu G.H., Lin M.C., Ju S.H., Wu C.C. Non-isothermal flow of a polymeric liquid through rounded L-channels // Plastics, Rubber and Composites. 2003. V. 32(7). P. 297–305. DOI: 10.1179/146580103225003451.
18. Norouzi M., Kayhani M.H., Nobari M.R.H., Demneh M.K. Convective Heat Transfer of Viscoelastic Flow in a Curved Duct // Int. J. Mechanical and Mechatronics Engineering. 2009. V. 3(8). P. 921–927.
19. Борзенко Е.И., Шрагер Г.Р. Установившееся неизоэтермическое течение степенной жидкости в плоском/осесимметричном канале // Вестн Том. гос. ун-та. Математика и механика. 2018. № 52. С. 41–52. DOI: 10.17223/19988621/52/5.
20. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и механики жидкости. М.: Энергоатомиздат, 1984. 152 с.

Статья поступила 14.12.18 г.

Dyakova O.A., Frolov O.Yu. (2019) INVESTIGATION OF THE STRUCTURE OF NON-ISOTHERMAL POWER-LAW FLUID FLOW IN AN L-SHAPED CHANNEL. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 58. pp. 71–83

DOI 10.17223/19988621/58/6

Keywords: flow, viscous fluid, non-Newtonian fluid, L-shaped channel, dissipative heating, numerical simulation, kinematics

This paper is devoted to the investigation of a steady-state non-isothermal power-law fluid flow in a flat L-shaped channel with account for viscous dissipation. Mathematical model of the flow includes the motion, continuity, and energy equations written using the dimensionless variables in a Cartesian coordinate system. The fluid rheological behavior is described by the Ostwald–de Waele power law with an exponential dependence of the consistency on temperature. The control volume method and the SIMPLE procedure are applied to solve the formulated problem numerically using the staggered computational grid. The effect of both power-law index and Reynolds and Brinkman numbers on the size of recirculation zones observed in the vicinity of internal and external angles of the L-channel and on the size of two-dimensional flow regions is studied. It is found that the variation in the intensity of mechanical energy dissipation in a stream leads to a weak change in the flow pattern. Considering rising of the power-law index from the values providing pseudoplastic properties of the fluid to that providing dilatant properties, the size of recirculation zone in the vicinity of internal angle is found to tend to a constant value. With an increase in the power-law index, the two-dimensional flow region ahead of the stream turn increases and tends to a constant value, and after turn it decreases. The results obtained for a Newtonian fluid are in a good agreement with numerical and experimental data of other authors.

Financial support. This work was supported by the Russian Foundation for Basic Research (project № 18-38-00259).

DYAKOVA Olga Alekseevna (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: dyakova_o@ftf.tsu.ru

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

REFERENCES

1. Naphon P., Wongwises S. (2006) A review of flow and heat transfer characteristics in curved tubes. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 10(5). pp. 463–490. DOI: 10.1016/j.rser.2004.09.014.
2. Ojha R.K., Joshi P.V. (2014) A review of fluid flow and heat transfer analysis on curved duct. *Proceedings of All India Conference on «Intelligent systems» in Mechanical and Mechatronics Engineering*. pp. 5.156–5.159. DOI: 10.13140/2.1.1540.4166.
3. Rauwendaal C. (2001) *Polymer Extrusion*. Munich: Hanser Gardner Publications.
4. Froysheter G.B., Danilevich S.Yu., Radionova N.V. (1990) *Techenie i teploobmen nen'yutonovskikh zhidkostey v trubakh* [Flow and heat transfer of non-Newtonian fluids in the pipes]. Kiev: Naukova dumka.
5. Ghobadi M., Muzychka Y.S. (2016) A review of heat transfer and pressure drop correlations for laminar flow in curved circular ducts. *Heat Transfer Engineering*. 37(10). pp. 815–839. DOI: 10.1080/01457632.2015.1089735.
6. Soeberg H. (1988) Viscous flow in curved tubes–I. Velocity profiles. *Chemical Engineering Science*. 43(4). pp. 855–862. DOI: 10.1016/0009-2509(88)80081-2.
7. Winters K.H. (1987) A bifurcation study of laminar flow in a curved tube of rectangular cross-section. *Journal of Fluid Mechanics*. 180. pp. 343–369. DOI: 10.1017/S0022112087001848.

8. Soh W.Y. (1988) Developing fluid flow in a curved duct of square cross-section and its fully developed dual solutions. *Journal of Fluid Mechanics*. 188. pp. 337–361. DOI: 10.1017/S0022112088000758.
9. Bara B., Nandakumar K., Masliyah J.H. (1992) An experimental and numerical study of the Dean problem: flow development towards two-dimensional multiple solutions. *Journal of Fluid Mechanics*. 244. pp. 339–376. DOI: 10.1017/S0022112092003100.
10. Kawaguti M. (1969) Numerical study of the flow of a viscous fluid in a curved channel. *The Physics of Fluids*. 12. pp. II-101–II-104. DOI: 10.1063/1.1692420.
11. Tsai S.F., Sheu T.W.H. (2007) Numerical exploration of flow topology and vortex stability in a curved duct. *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 71. pp. 564–582. DOI: 10.1002/nme.1959.
12. Borzenko E.I., Diakova O.A., Shrager G.R. (2014) Issledovanie yavleniya proskal'zyvaniya v sluchae techeniya vyazkoy zhidkosti v izognutom kanale [Studying the slip phenomenon for a viscous fluid flow in a curved channel]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 2(28). pp. 35–44.
13. Perera M.G.N., Walters K. (1977) Long-range memory effects in flows involving abrupt changes in geometry. Part I: Flows associated with L-shaped and T-shaped geometries. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. 2(1). pp. 49–81. DOI: 10.1016/0377-0257(77)80032-3.
14. Cochrane T., Walters K., Webster M.F. (1982) Newtonian and non-Newtonian flow near a re-entrant corner. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*. 10(1-2). pp. 95–114. DOI: 10.1016/0377-0257(82)85007-6.
15. Chono S., Iemoto Y. (1990) Generation of reverse flow of viscoelastic fluid upstream of re-entrant corner in two-dimensional L-shaped channel. *Journal of Rheology*. 34(3). pp. 295–308. DOI: 10.1122/1.550130.
16. Chono S., Iemoto Y. (1992) Numerical simulation of viscoelastic flow in two-dimensional L-shaped channels. *Journal of Rheology*. 36(2). pp. 335–356. DOI: 10.1122/1.550369.
17. Wu G.H., Lin M.C., Ju S.H., Wu C.C. (2003) Non-isothermal flow of a polymeric liquid through rounded L-channels. *Plastics, Rubber and Composites*. 32(7). pp. 297–305. DOI: 10.1179/146580103225003451.
18. Norouzi M., Kayhani M.H., Nobari M.R.H., Demneh M.K. (2009) Convective heat transfer of viscoelastic flow in a curved duct. *International Journal of Mechanical and Mechatronics Engineering*. 3(8). pp. 921–927.
19. Borzenko E.I., Shrager G.R. (2018) Ustanovivsheesya neizotermicheskoe techenie stepennoy zhidkosti v ploskom/osesimmetrichnom kanale [Non-isothermal steady flow of power-law fluid in a planar/axisymmetric channel]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 52. pp. 41–52. DOI 10.17223/19988621/52/5.
20. Patankar S.V. (1980) *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. New York: Hemisphere Publishing Corporation.

Received: December 14, 2018

УДК 622.245.51

DOI 10.17223/19988621/58/7

П.Н. Зятиков, К.В. Синебрюхов, Ю.С. Березовский, А.С. Трушко**ВЛИЯНИЕ НАПРАВЛЕНИЯ ТРЕЩИН
МНОГОСТАДИЙНОГО ГИДРАВЛИЧЕСКОГО РАЗРЫВА ПЛАСТА
НА КОЭФФИЦИЕНТ ИЗВЛЕЧЕНИЯ НЕФТИ**

Приведены аналитические выражения для нормирования фактических данных запускных параметров работы скважины. Результаты сравнения безразмерного индекса продуктивности выборки перенесены на математическую модель сектора месторождения для выбора эффективного направления горизонтального участка ствола скважины. Приведен пример использования метода Local Grid Refinement, основанного на локальном измельчении ячеек в области образования трещин многостадийного гидравлического разрыва пласта для увеличения точности задания данных трещин в математической модели.

Ключевые слова: безразмерный коэффициент продуктивности скважины, Local Grid Refinement, нефтегазовые месторождения, малопроницаемый коллектор.

Технология многостадийного гидравлического разрыва пласта не новая, однако, на месторождениях Томской области ее применения начались не так давно. Для данной технологии необходимо пробурить скважину с горизонтальным окончанием и провести на горизонтальном участке несколько стадий гидравлического разрыва пласта [1] с определенным расстоянием между стадиями, тем самым получив рядом с горизонтальным участком ствола зону с большой проницаемостью, что позволит отбирать больше жидкости [2].

Однако не везде данная технология показывает желаемые результаты в виде положительной экономики и увеличения дебита скважин [3, 4]. Успешность проекта зависит от изученности объекта разработки, технологического выполнения бурения и проведения многостадийного гидравлического разрыва пласта (МГРП), выбора оптимальных параметров скважины и так далее [2].

Движение углеводородов в пластах в гидродинамике описывается с помощью законов сохранения энергии, импульса и массы. Однако применение этих законов для описания течения трехфазной смеси (нефть – газ – вода) в породе-коллекторе является сложной и емкой задачей. На практике, для упрощения используется полупэмпирический подход, основанный на применении закона Дарси вместо уравнения сохранения количества движения. Изотермический процесс движения углеводородов через пористую среду описывается уравнениями сохранения массы, законом Дарси с уравнениями фазового состояния [5]. При рассмотрении неизо-термических процессов учитывается уравнение сохранения энергии и уравнение неразрывности в цилиндрической системе координат (r, θ, z) , которое имеет вид

$$-\left[\frac{1}{r} \frac{\partial (\rho r u_r)}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial (\rho u_\theta)}{\partial \theta} + \frac{\partial (\rho u_z)}{\partial z} \right] = \frac{\partial}{\partial t} (\rho r) + \tilde{q}, \quad (1)$$

где $\tilde{q}$ – распределение внутри объема внешнего источника или стока с массовой интенсивностью q , которое за время At составит $qV\Delta t$ [5].

Для многофазной многокомпонентной фильтрации в пласте необходимо уравнение неразрывности представить следующим образом [6]: рассматриваемая система состоит из n_l фаз и n_k компонентов. Обычно рассматривается трехфазная система (нефть, вода, газ). На месторождениях Томской области вода является смачивающей фазой, газ – не смачивающей фазой, а нефть имеет промежуточную смачиваемость. В углеводородных системах во время фильтрации флюида между фазами происходят массообменные процессы, поэтому закон сохранения массы должен выполняться для каждого компонента смеси. В разных фазах каждый компонент будет иметь свою концентрацию, при этом перемещение каждой фазы будет иметь свою собственную скорость.

Насыщенность l -й фазой s_l определяется как доля порового пространства элементарного объема, занятая данной фазой. Если c_{lj} – массовая концентрация j -го компонента в l -й фазе, то уравнение неразрывности для j -го компонента имеет вид: [5]

$$-\sum_{l=1}^{n_l} \operatorname{div}(\rho_l c_{lj} u_l) = \frac{\partial}{\partial t} \left(m \sum_{l=1}^{n_l} s_l c_{lj} \rho_l \right) + \sum_{l=1}^{n_l} \tilde{q}_l a_{lj}, \quad (2)$$

где q_i – интенсивность источника l -й фазы, а c_{lj} – массовая компонента j в l -й фазе. Уравнение (2) учитывает только конвективный массоперенос, диффузионные процессы не учитываются.

Широкое применение для гидрадинамического моделирования пластов месторождения получила модель нелетучей нефти (*black oil model*), когда углеводородную систему можно аппроксимировать двумя компонентами: нелетучим (нефтью) и летучим (газом), растворимым в нефтяной фазе. Для данной модели предполагается, что в пласте есть три отдельные фазы: нефть, вода и газ. Нефть и вода не смешиваются между собой, при этом газ при определенных параметрах растворяется в нефти и не растворяется в воде. При этом предполагается, что флюиды в пласте находятся в состоянии термодинамического равновесия при постоянной температуре.

Если индекс $i = 1, 2$ относится к нефтяному и газовому компонентам, $l = o, w, g$ соответствует нефтяной, водной и газовой фазам. Тогда $c_{gi} = 0$, $c_{g2} = 1$, $c_{wi} = c_{w2} = 0$. Зависимость объема от давления и температуры в системе может быть выражена с помощью объемных коэффициентов B_i . Данные коэффициенты будут показывать, во сколько раз изменяется объем жидкости при выносе ее на свободную поверхность:

$$B_i = V_i / V_{i0}. \quad (3)$$

Здесь V_i и V_{i0} – объем жидкости l -й фазы в пластовых и в нормальных условиях. Растворимость газа в нефти R определяет количество газа, растворенного в нефти. Предполагается, что в стандартных условиях растворимость равна нулю. Поэтому при выносе нефти на свободную поверхность можно определить объем дегазированной нефти V_{0q} и объем растворенного газа V_{dg0} , выделяющегося из нефти:

$$R = V_{dg0} / V_{o0}. \quad (4)$$

Экспериментально установлено, что при многофазной фильтрации закон Дарси может в широких пределах считаться справедливым для каждой фазы в отдельности [7]:

$$u_l = -\frac{k_l}{\mu_l} (\nabla p_l - \rho_l g \nabla z), \quad (3)$$

где k_l – фазовая проницаемость, которая, как и абсолютная проницаемость, явля-

ется тензорной функцией; индекс $l = o, w, g$ соответствует фазе. Относительные фазовые проницаемости k_{rl} определяются выражениями:

$$k_l = k k_{rl}. \quad (4)$$

Многокомпонентная модель позволяет рассматривать достаточно сложные процессы фильтрации в нефтегазоконденсатных пластах с учетом межфазного массообмена отдельными компонентами [8]. Если рассматриваемая система состоит из n_l фаз и n_c компонентов, то подстановка уравнений движения (8) в уравнение неразрывности для каждого компонента (2) дает n_c уравнений:

$$\sum_{l=1}^{n_l} \operatorname{div} \left[\rho_l c_{lj} \frac{k k_{rl}}{\mu_l} (\nabla p_l - \rho_l g \nabla z) \right] = \frac{\partial}{\partial t} \left(m \sum_{l=1}^{n_l} s_l c_{lj} \rho_l \right) + \sum_{l=1}^{n_l} \tilde{q}_l \alpha_{lj}, j = 1. \quad (5)$$

Относительные фазовые проницаемости зависят от целого ряда характеристик: насыщенностей, градиента давления, капиллярных сил, структуры порового пространства и других параметров. Поскольку наиболее существенно фазовые проницаемости зависят от насыщенностей, в большинстве моделей фильтрации предполагается, что фазовые проницаемости являются функциями только насыщенностей.

Для решения многих практических задач многокомпонентной фильтрации используются различные допущения:

- пренебрегают капиллярным скачком давления между фазами и предполагают, что давления в фазах равны ($p_l = p$ для любого l);
- несколько компонентов, совместимых по характеру зависимостей давление – объем – температура и данным закона равновесия, группируют, снижая тем самым количество неизвестных;
- концентрации углеводородных компонентов в воде принимают равными нулю ($c_{wj} = 0$ для любого $j \neq w$), т. е. предполагают, что массоперенос этих компонентов происходит только в нефтяной и газовой фазах.

При упрощении можно считать достаточным использование четырехкомпонентной модели, в которой углеводородная система моделируется тремя условными компонентами: легким газом, конденсатом (летучим компонентом) и нефтью (нелетучим компонентом). Каждый из этих трех компонентов может присутствовать в нефтяной фазе. В газовой фазе может присутствовать только два компонента: газовый и летучий (конденсат). Четвертый компонент – вода – содержится только в водной фазе, которая не смешивается и не обменивается массами с остальными фазами.

Моделирование нефтегазовых залежей или процессов закачки газа в нефтяные пласты осуществляется с использованием модели трехфазной фильтрации [8, 9]. Наиболее распространенной является модель нелетучей нефти Маскета – Мереса (*black oil model*), в которой углеводородная система аппроксимируется двумя компонентами: нефтью и газом, растворимым в нефти. Подстановка закона Дарси (3) в уравнения сохранения для трехфазной системы дает

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \left(\frac{k_o}{\mu_o B_o} (\nabla p_o - \rho_o g \nabla z) \right) &= \frac{\partial}{\partial t} \left(m \frac{s_o}{B_o} \right) + Q_o, \\ \operatorname{div} \left(\frac{k_g}{\mu_g B_g} (\nabla p_g - \rho_g g \nabla z) + \frac{R k_o}{\mu_o B_o} (\nabla p_o - \rho_o g \nabla z) \right) &= \frac{\partial}{\partial t} \left(m \left(\frac{s_g}{B_g} + \frac{s_o R}{B_o} \right) \right) + Q_{fg, + R Q_o} \quad (6) \\ \operatorname{div} \left(\frac{k_w}{\mu_w B_w} (\nabla p_w - \rho_w g \nabla z) \right) &= \frac{\partial}{\partial t} \left(m \frac{s_w}{B_w} \right) + Q_w. \end{aligned}$$

Для замыкания системы уравнений (5) используются соотношения (4), (5):

$$\begin{aligned} p_o - p_w &= p_{ow}(s_g, s_o, s_w). \\ p_g - p_o &= p_{go}(s_g, s_o, s_w). \\ s_g + s_o + s_w &= 1 \end{aligned} \quad (7)$$

В случае анизотропного по проницаемости пласта дебит скважины и эквивалентный радиус блока определяются следующим образом [10]:

$$Q_0 = \frac{2\pi\sqrt{k_x k_y} \Delta z}{\mu} \frac{p_0 - p_w}{\ln r_0 / r_w}; \quad (8)$$

$$r_0 = 0.28 \frac{\sqrt{\sqrt{k_y/k_x}(\Delta x)^2 + \sqrt{k_x/k_y}(\Delta y)^2}}{\sqrt[4]{k_y/k_x} + \sqrt[4]{k_x/k_y}}. \quad (9)$$

Выражения (8), (9) получены для отдельно стоящей скважины, в предположении, что другие скважины и границы пласта достаточно удалены и не влияют на характер фильтрации вблизи нее. Практически это значит, что между соседними скважинами должно быть не менее 10 ячеек, а между скважиной и ближайшей границей моделируемой области – не менее 5 ячеек.

Для моделирования горизонтальной скважины, направленной вдоль одной из осей x или y , применимы выражения (8), (9).

Ограничения в использовании представленных зависимостей для горизонтальных скважин связаны с большой разницей в размерах сеточных блоков Δz и Δx . Большие различия в размерах сеточных блоков в направлениях, перпендикулярных оси скважины, Δz и Δx , приводят к неравномерности распределения потока.

Важным параметром для успешного запуска скважины является ориентация в пространстве ее горизонтального участка. Это обуславливается региональным стрессом, который на Юрских отложениях Западной Сибири составляет около 140° (320°) по азимуту (см. рис. 1). При гидравлическом разрыве пласта образуется трещина, которая распространяется по линии напряженности.

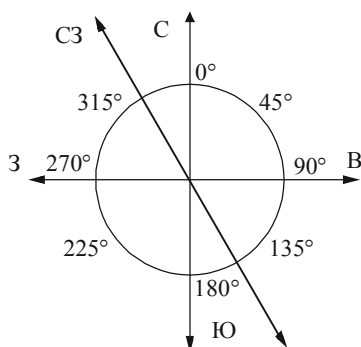


Рис. 1. Расположение линии стресса на территории Томской области
Fig. 1. Location of the stress line in the Tomsk region territory

В связи с этим при расположении горизонтального участка ствола параллельно линии регионального стресса при проведении МГРП с большей вероятностью будут образовываться продольные, относительно ствола скважины, трещины

(рис. 2, *a*), а при расположении горизонтального участка ствола перпендикулярно линии регионального стресса – поперечные (рис. 2, *b*) [11].

Для проведения исследования были выбраны скважины с горизонтальным стволом (в том числе боковые нарезки горизонтального ствола (ЗБГС)), на которых были проведены две или более стадий ГРП. Скважины отобраны с 7 месторождений, расположенных в Западной Сибири, все скважины вскрывают продуктивные пласты Юрских отложений. В выборке участвовали скважины с длинным горизонтальным участком от 190 до 880 м, количество стадий на данных скважинах от 2 до 7.

В ходе исследований была проанализирована выборка из 49 ГС/ЗБГС с МГРП, пробуренных на Юрских пластах месторождений Западной Сибири компанией АО «Томскнефть». По результатам отбраковки данных выборка была сокращена до 42 скважин.

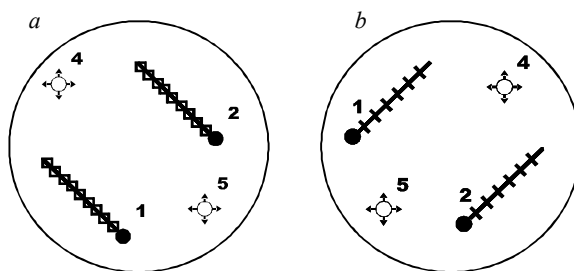


Рис. 2. Расположение трещин относительно ствола скважины:
a – продольное, *b* – поперечное

Fig. 2. Arrangement of the cracks relative to the wellbore:
(*a*) longitudinal and (*b*) transverse

Для приведения скважин к одним условиям стартовые дебиты были нормированы по следующим параметрам: депрессия, проницаемость, толщина пласта, вязкость, длина горизонтального участка. Для этого использовался безразмерный коэффициент продуктивности горизонтального ствола.

Безразмерный индекс продуктивности необходим для сравнения скважин, приведенных к независимым от параметров пласта условиям.

С учетом того, что в рассматриваемых нами условиях длина пласта достаточно велика по сравнению с его эффективной толщиной, через некоторое время после запуска скважины волна возмущения достигнет подошвы пласта, и в направлении z произойдет переход на линейный режим течения раннего времени (приток с торцевой части ствола примем незначительным). Следовательно, безразмерный индекс продуктивности может быть рассчитан по формуле:

$$J_d = \frac{1}{P_d(t_{dp})}, \quad (10)$$

где $P_d(t_{dp})$ – безразмерное давление на момент времени запуска.

Безразмерное время начала линейного режима работы:

$$t_{del} = 0.116 h_d^2, \quad (11)$$

где h_d – безразмерная толщина пласта.

Безразмерный перепад давления для горизонтального ствола [12]

$$P_{del} = P_{der}(t_{del}) + 2\sqrt{\pi}(\sqrt{t_d} - \sqrt{t_{del}}). \quad (12)$$

сторождений были рассчитаны варианты с расположением скважины параллельно и перпендикулярно региональному стрессу. Для каждого варианта были рассчитаны модели с разной проницаемостью (1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10 и 20 мД).

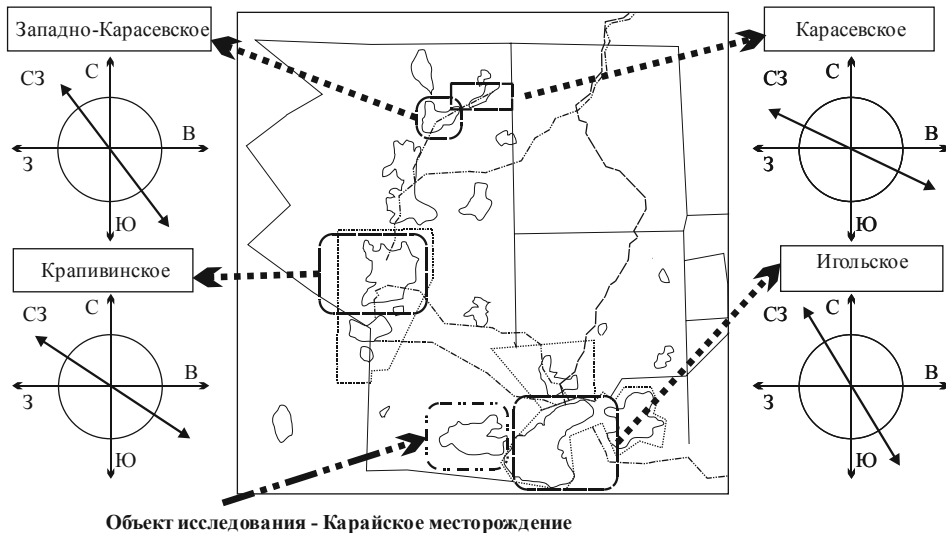


Рис. 4. Направление регионального стресса, полученное в результате проведения исследований с помощью акустического каротажа
Fig. 4. Direction of the regional stress resulting from the study carried out using the acoustic logging

При расчёте эффекта от многостадийного гидравлического разрыва пласта на горизонтальных скважинах, пересекаемых системой вертикальных трещин, с учётом притока непосредственно в ствол скважины, оценка производилась на основе формулы Li (рис. 5):

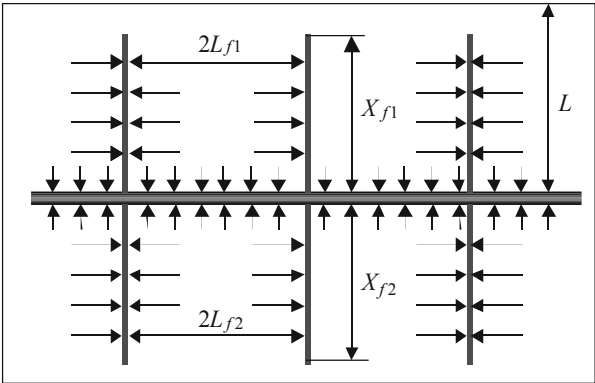


Рис. 5. Оценка эффекта для горизонтальной скважины, пересекаемой системой вертикальных трещин МГРП, с учётом притока непосредственно в ствол скважины
Fig. 5. Effect assessment for a horizontal well intersected by a system of vertical cracks in a multistage hydraulic fracturing with account for an inflow directly into the wellbore

$$Q_i = 1.7054 \cdot 10^{-2} \frac{\Delta p}{\mu_0 B_0 \left(a + \frac{1}{b} + b \right)}; \quad (13)$$

$$a = \frac{1}{khx_f \left(\frac{1}{L_{f1}} + \frac{1}{L_{f2}} \right)} + \frac{c}{k_f w}; \quad (14)$$

$$b = \frac{kL_D (L_{f1} + L_{f2})}{c}; \quad (15)$$

$$c = \frac{x_f}{h} - \frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \ln \frac{h}{2r_w}; \quad (16)$$

$$d = \frac{L - x_f}{kh(L_{f1} + L_{f2})}, \quad (17)$$

где B_0 – объёмный коэффициент нефти, доли ед.; h – эффективная мощность пласта, м; k – проницаемость пласта, мД; k_f – проницаемость трещины, мД; L – длина горизонтального ствола, м; L_{f1} – половина расстояния от трещины до соседней трещины слева, м; L_{f2} – половина расстояния от трещины до соседней трещины справа, м; L^* – расстояние от горизонтального ствола до границы резервуара, м; n – количество трещин ГРП; P_r – пластовое давление, атм.; P_{wf} – давление на забое горизонтальной скважины, атм.; Δp – общий перепад давления в резервуаре, атм.; Q – общий дебит скважины по жидкости, м³/сут; Q_i – приток в одну трещину ГРП, м³/сут; r_w – радиус горизонтального ствола, м; w – ширина трещины ГРП, м; x_f – полудлина трещины ГРП, м; μ_0 – вязкость нефти, сПз [13].

Гидродинамические модели просчитывались в программном обеспечении tNavigator. На данной программе моделировалась однородная секторная модель, на которой задавались горизонтальные скважины с МГРП.

При описании течения жидкости в пласте, которая возникает после гидравлического разрыва пласта необходимо вводить все параметры трещины, такие, как описание траектории самой трещины, возникающей после проведения ГРП. Как раз траектория и задание необходимых параметров в ячейках позволили получить адаптированные модели трещин относительно ориентации горизонтального стола скважины. Возможны два варианта задания трещины:

Ручное указание дополнительных связей некоторых участков перфорации скважины с блоками сетки, возникшее в силу прохождения через них трещины.

Автоматическое создание связей указанного участка перфорации со всеми блоками сетки, попавшими в параллелепипед, определяющийся по заданным параметрам азимута, полудлины, раскрытия и высоты трещины.

Для выбранного участка перфорации x , соединенного с блоком y , благодаря трещины ГРП, установим (индекс z ниже проходит только по номерам блоков трещины между блоками x и y) [14, 15]

$$Y_y^x = \frac{M_x}{\sum_z \frac{1}{K^z}}, \quad (18)$$

где K^z – проводимость вдоль трещины в блоке z . Данные выражения являются аналогами формулам для вычисления коэффициентов проводимости блоков (ячеек) сетки и обеспечивают:

- нулевое значение $\gamma_y^x = 0$, если проницаемость K^z хотя бы одного из участков трещины между участками x и y (включительно) равна нулю;
- накопительный характер для возникновения явления сопротивления течению между участками x и y в зависимости от длины и проводимости пути между ними [16].

Чтобы адаптировать модель к фактическим данным, полученным при анализе опыта проведения МГРП, и вывести зависимость от величины проницаемости разрабатываемой залежи, необходимо задать величины K^z , зависящие от таких параметров, как [17]

- давление в блоке, через который проходит трещина;
- площадь трещины и свойства самого пропантанта;
- коэффициент охвата;
- поток, прошедший через связку блоков;
- время прохождения потоком блоков.

Одним из вариантов задания ГРП на скважине является метод виртуальной перфорации. Для этого необходимо заменить трещину в пределах одного блока z на виртуальный участок перфорации со следующими параметрами перфорации:

- Длина перфорированного участка должна быть равна длине трещины в моделируемом блоке.
- Приток в участок перфорации скважины должен определять проницаемостью блока в направлении, ортогональном грани трещины с наибольшей площадью.

Благодаря использованным данным можно вычислить множитель проводимости выбранного виртуального участка перфорации (обозначим его $\theta^{w,z}$), а затем вычислить приток по обычной формуле.

Иллюстрация вычислений приведена на рис. 6. На рисунке изображена трещина, которая протекает по оси Y , высотой h и шириной w , намного меньшей h . Приток в такую трещину будем считать равным притоку в скважину диаметром $d = 2(w + h) = p$, имеющую ориентацию Y и находящуюся в блоке с проницаемостью по X и Z , равной проницаемости:

$$\theta^{w,z} = \frac{2\pi\beta_c K^{w,z} h^{w,z}}{\log(r_0^{w,z} / r_w^{w,z})}; \quad (19)$$

$$r_0^{w,z} = \frac{(w + h)}{\pi}; \quad (20)$$

$$r_w^{w,z} = 0.14\sqrt{DX^2 + DZ^2}; \quad (21)$$

$$K^{w,z} = PERMX; \quad (22)$$

$$h^{w,z} = DY, \quad (23)$$

где DX, DY, DZ – геометрические размеры блока, через который проходит трещина.

Если необходимо задать большую высоту или полудлину трещины ГРП в виде цепочки соединительных блоков методом виртуальной перфорации, получаем неэффективную, с точки зрения вычисления, модель. Поэтому для задания трещины необходимо использовать модель, основанную на создании трещины методом виртуальной перфорации в каждом блоке, через который проходит скважина. Для

такого типа задания трещины используем формулу притока смеси и закон транспортировки в ствол скважины через трещину. Достоинством такого подхода является невысокая вычислительная сложность, а недостатком – невозможность разделить приток из трещины ГРП между участками перфорации скважины (т.е. приток вычисляется из трещины в скважину, а не в конкретный участок перфорации).

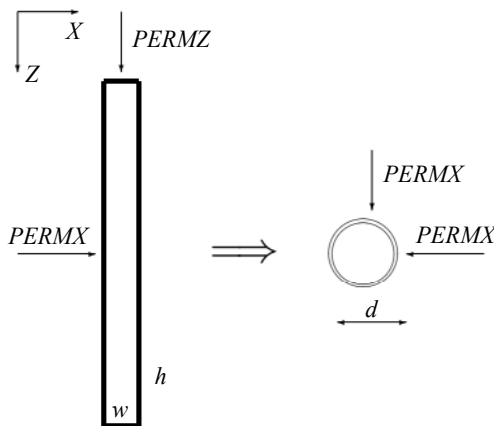


Рис. 6. Вычисление эквивалентного притока в трещину
Fig. 6. Calculation of the equivalent inflow into the crack

Будем использовать то же задание трещины, для этого обозначим все блоки, через которые прошла трещина как $x_1 \dots x_L$, среднюю длину трещины в блоке x_i – через L_{x_i} . Соответственно площадь сечения трещины в блоке x_i зададим как S_{x_i} . Для другой ориентации трещины в пространстве вычисления аналогичны. Для вычисления притока из блока x_i используем формулу (2):

$$\theta^{w,z} = \frac{2\pi\beta_c \text{PERMX} \cdot L_{x_i}}{\log(0.28 \cdot \pi \cdot \sqrt{DX^2 + DZ^2}) / S_{x_i}}, \quad (24)$$

Для вычисления течения вдоль самой трещины необходимо задать проницаемость пропанта K_p и зависимость проницаемости от притока жидкости (зависимость задается как некоторая функция f безразмерного потока s).

Результирующая эффективная проводимость пропанта в блоке x_i с площадью сечения S_{x_i} полагается равной

$$K_{x_i}(p^{x_i}, s) = K(p^{x_i}) S_{x_i} f(s). \quad (25)$$

Заметим, что функция $K_{x_i}(p^{x_i}, s)$ является безразмерной. Мы хотим определить выражение Y_{x_i} для эффективности течения вдоль трещины из блока в скважину так, чтобы:

1. Y_{x_i} является только функцией D_{x_i} при $K_p = \infty$, $Y_{x_i} = 1$ при $K_p = \infty$ и $D_{x_i} = 0$, что соответствует дренированию блока, в котором находится сама скважина;
2. $Y_{x_i} = 0$ при $K_p = 0$;
3. $Y_{x_i} = 0$ при $s = \infty$.

Рассмотрим в качестве первоначального теста следующую функцию:

$$Y_{x_i}(p^{x_i}, s) = \frac{K_{x_i}(p, s)}{1 + K_{x_i}(p, s)} \cdot \frac{1}{1 + D_{x_i}/L_{x_i}}, \quad (26)$$

Заметим, что величина $Y_{x_i}(p^{x_i}, s)$ является безразмерной.

При вычислении $Y_{x_i} = Y_{x_i}(p^{x_i}, s)$ мы будем брать значение накопленного потока в s и давления p^{x_i} в блоке x_i с предыдущего шага по времени, чтобы минимизировать дополнительно вносимую нелинейность. Поровый объем блока (при вычислении безразмерного потока s) вычисляется один раз при вводе ГРП.

Для точности задания МГРП в модели использовался метод LGR (Local Grid Refinement). Данный метод заключается в локальном измельчении ячеек в области образования трещин МГРП. Измельчение производилось вплоть до размеров ячейки порядка 4 мм, что соизмеримо с шириной образованной трещины при проведении гидравлического разрыва пласта. Для остальных добывающих скважин сектора при моделировании трещин гидравлического разрыва пласта на горизонтальных скважинах использовался метод задания виртуальных перфораций (см. рис. 7).

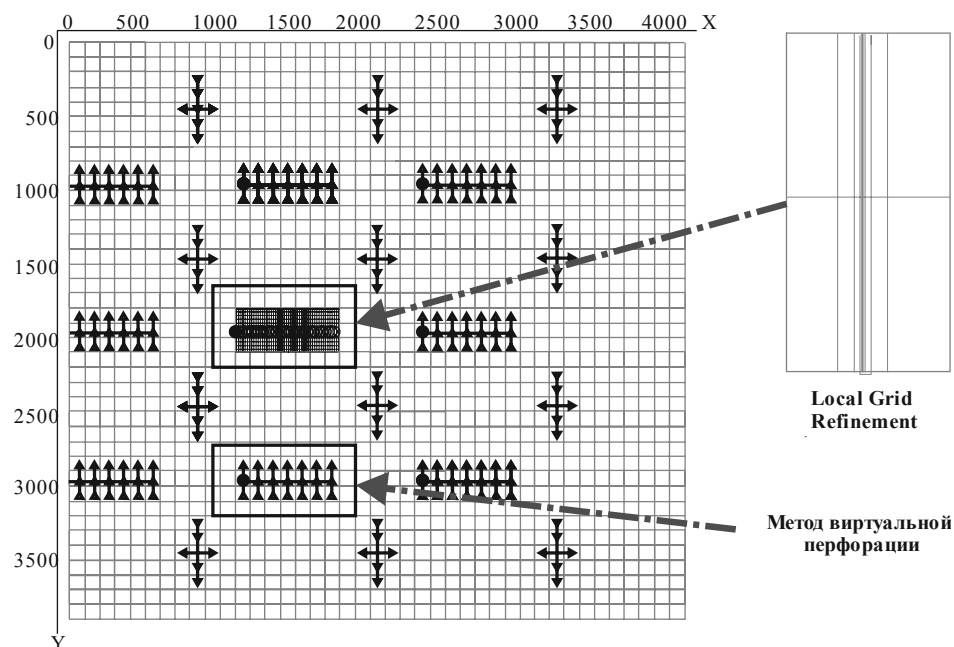


Рис. 7. Секторная модель Карайского месторождения с использованием задания трещин гидравлического разрыва пласта методом виртуальных перфораций и LGR

Fig. 7. Sector model of the Karay oil field developed including hydraulic fracturing cracks assigned by the method of virtual perforations and LGR

Таким образом, на гидродинамической модели было рассчитано 22 варианта и получены следующие зависимости накопленной добычи нефти от проницаемости породы коллектора для двух типов трещин МГРП (рис. 8 и 9).

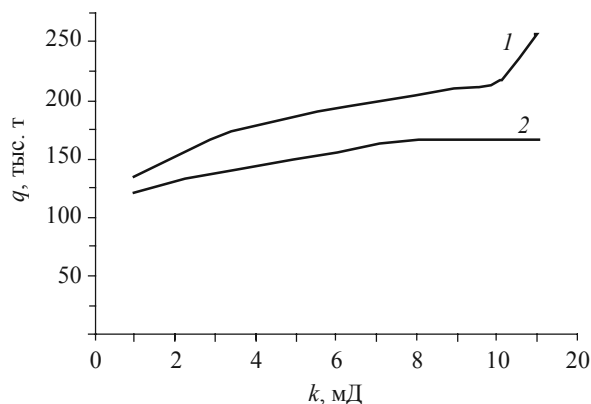


Рис. 8. Зависимость накопленной добычи нефти от проницаемости породы коллектора для двух типов трещин МГРП, кр. 1 – продольное расположение трещин, кр. 2 – поперечное расположение трещин

Fig. 8. Accumulated oil recovery as a function of reservoir rock permeability for two types of cracks in a multistage hydraulic fracturing: longitudinal (curve 1) and transverse (curve 2) arrangement of the cracks

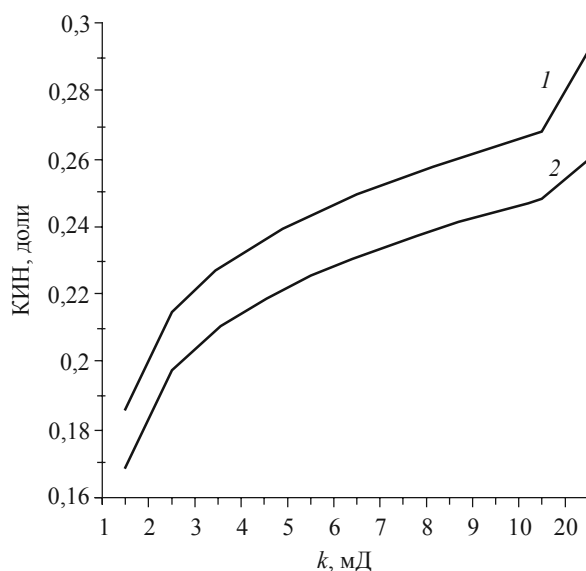


Рис. 9. Зависимость коэффициента извлечения нефти от проницаемости породы коллектора для двух типов трещин МГРП, кр. 1 – продольное расположение трещин, кр. 2 – поперечное расположение трещин

Fig. 9. Oil recovery factor as a function of reservoir rock permeability for two types of cracks in a multistage hydraulic fracturing: longitudinal (curve 1) and transverse (curve 2) arrangement of the cracks

При этом коэффициент извлечения нефти рассчитывался по формуле

$$\text{КИН} = Q_{\text{изн}} / Q_{\text{гзн}} \quad (27)$$

где $Q_{\text{изн}}$ – извлекаемые запасы нефти, $Q_{\text{гзн}}$ – геологические запасы нефти.

Результаты расчётов показали, что накопленная добыча нефти при продольной ориентации трещин МГРП выше, чем на поперечных трещинах в среднем на 7 % независимо от проницаемости. Это обуславливается тем, что стартовые дебиты при поперечном расположении трещины выше в 1.38 раза, относительно продольного расположения, следовательно, просадка давления происходит намного быстрее, вследствие чего образуется конус пониженного давления [18, 19]. Скважина с таким расположением трещины по сравнению с продольным расположением характеризуется быстрым темпом падения дебита нефти и ростом обводненности продукции [19]. Для выбора оптимальной стратегии разработки месторождения с юрским продуктивным пластом необходимо учитывать данные исследования и, опираясь на экономические показатели, выбирать ориентацию горизонтального участка ствола скважины относительно направления регионального стресса.

ЛИТЕРАТУРА

1. Stewart G. 2011. Well Test Analysis Prof. George, Prof, Mahmoud Jamiolahmady.
2. Черевко М.А., Янин А.Н., Янин К.Е. Разработка нефтяных месторождений Западной Сибири горизонтальными скважинами с многостадийными гидроразрывами пласта. Тюмень; Курган: Зауралье, 2015. 268 с.
3. Berezovsky Y.S., Gusev P.Y. Choosing of optimum technology of development field C PK layers, containing high viscosity oil with bottom water and gas cap // Проблемы геологии и освоения недр: XIX Международный научный симпозиум им. акад. М.А.Усова, г. Томск, 6–10 апреля 2015 г. Томск: ИПР ТПУ, 2015. С. 782–784.
4. Gusev P.Yu., Berezovsky Yu.S., Slobodyan S.M. Optimization of development of a sector of oil-gas condensate field X using and integrated field model // Innovative Technologies in Oil Industry: Digest West Siberian Petroleum Conference, 28–29 May 2015, Tyumen. P. 115–119.
5. Каневская Р.Д. Математическое моделирование разработки месторождений нефти и газа с применением гидравлического разрыва пласта. М.: Недра, 1999. 213 с.
6. Розенберг М.Д., Кундин С.А. Многофазная многокомпонентная фильтрация при добыче нефти и газа. М.: Недра, 1976. 335 с.
7. Кричлоу Г.Б. Современная разработка нефтяных месторождений. Проблемы моделирования. М.: Недра, 1979. 303 с.
8. Азиз Х., Сеттари Э. Математическое моделирование пластовых систем. М.: Недра, 1982. 408 с.
9. Маскет М. Физические основы технологии добычи нефти. М.: Гостехиздат, 1953. 606 с.
10. Peaceman D.W. Interpretation of well-block pressures in numerical reservoir simulation with nonsquare grid blocks and anisotropic permeability // SPE Journal. 1983. V. 23. No. 3. P. 531–543.
11. Economides M.J. & Martin A.N. How to Decide Between Horizontal Transverse, Horizontal Longitudinal and Vertical Fractured Completion // Annual Technical Conference and Exhibition held in Florence. Italy, Florence: Society of Petroleum Engineers, 2010.
12. Инструкция ОАО «ТомскНИПИнефть» по сопровождению рейтинга эксплуатационного бурения и резарезок боковых стволов № П1-01.05 И-0016 ЮЛ-068 от 30.10.2017 г.
13. Донской С.Е. Проект приказа «Правила подготовки технических проектов разработки месторождений углеводородного сырья». 194 с.

14. *Hamidullin M.R.* Numerical simulation of single-phase fluid flow to a horizontal well with fractures of a multistage hydraulic fracturing // Scientific Notes of Kazan University. Kazan: Publishing House of Kazan University, 2016. V. 158. P. 287–301.
15. *RFD: tNavigator*. Flow Simulator Technical Manual. 2016.
16. *Richardson J., Kerver J., Hafford J., Osoba J.* Laboratory determination of relative permeability // Trans. AIME. 1958. V. 195. No. 4-5.
17. *Balin D.V., Semenova T.V.* Impact of injection induced fracturing on cumulative oil production // Higher Educational Institutions News. NWFT' I GAS. Tumen: Industrial University of Tumen, 2017. V. 121. P. 43–47.
18. *Dongjin Xu, Ruiquan Liao, Zhiwen Li, Zhicheng Zhao, Fan Zhang.* Research on Productivity for Multi-stage Fracturing of Horizontal Wells // Chemical Engineering Transactions. Italian: AIDIC, 2015. V. 46. P. 1189–1194. DOI: 10.3303/CET1546199.
19. *Dongjin Xu, Ruiquan Liao, Zhiwen Li, Zhicheng Zhao, Fan Zhang.* A New Model to Predict the Unsteady Production of Fractured Horizontal Wells // Sains Malaysiana. Malaysiana, UKM Bangi: Penerbit UKM. 2016. V. 45(10). P. 1579–1587. DOI: 10.1016/j.petro. 2016.12.037.

Статья поступила 08.10.208 г.

Zyatikov P.N., Sinebryukhov K.V., Berezovsky Yu.S., Trushko A.S. (2019) IMPACT OF THE CRACK DIRECTION IN A MULTISTAGE HYDRAULIC FRACTURING ON THE OIL RECOVERY FACTOR. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 58. pp. 84–98

DOI 10.17223/19988621/58/7

Keywords: dimensionless productivity index, local grid refinement, oil and gas field, low-permeable reservoir.

The analytical expressions for normalization of the actual data on the well operation initial parameters are presented. The results of the dimensionless production index comparison are transferred to a mathematical model of the field sector in order to select an effective direction of the wellbore horizontal section. To determine an optimal production strategy, a synthetic model was developed using the tNavigator program. The Local Grid Refinement (LGR) method was applied to provide an accuracy of the mathematical model of a multistage hydraulic fracturing (MSHF) problem. This method represents a local grinding of the cells in the region of the MSHF cracks' formation. The grinding was carried out up to 4 mm in a cell size. A virtual perforation method was used for the rest of production wells in the sector. The models characterized by various permeability were calculated, and the following results were obtained: accumulated oil production in a longitudinal orientation of the MSHF cracks is higher than that in the transverse cracks, which is irrespective of the permeability. The initial oil production rate from a transverse crack location is higher, therefore, the pressure drop occurs much faster resulting in a low-pressure area formation. Such a crack arrangement in the well leads to a rapid decline of well and provides an increase in the water production.

ZYATIKOV Pavel Nikolaevich (Doctor of Technical Sciences, Professor, Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russian Federation).

SINEBRYUKHOV Kirill Vadimovich (Tomsk Oil and Gas Research and Design Institute, Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russian Federation).

BEREZOVSKY Yuriy Sergeevich (Tomsk Oil and Gas Research and Design Institute, Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russian Federation).

TRUSHKO Artem Stanislavovich (Tomsk Oil and Gas Research and Design Institute, Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russian Federation).

REFERENCES

1. Stewart G. (2011) *Well Test Design and Analysis*. Penn Well Corporation.
2. Cherevko M.A., Yanin A.N., Yanin K.E. (2015) *Razrabotka neftyanykh mestorozhdeniy Zapadnoy Sibiri gorizontallyimi skvazhinami s mnogostadiynymi gidrorazryvami plasta* [Development of the oil fields in Western Siberia using the horizontal wells with a multistage hydraulic fracturing]. Tyumen; Kurgan: Zauralye.
3. Berезovsky Yu.S., Gusev P.Yu. (2015) Choosing of optimum technology of development field C PK layers, containing high-viscosity oil with bottom water and gas cap. *Proceedings of the XIX International Scientific Symposium 'Problems of Geology and Subsurface Development'*. pp. 782–784.
4. Gusev P.Yu., Berезovsky Yu.S., Slobodyan S.M. (2015). Optimization of development of a sector of oil-gas condensate field X using and integrated field model. *Proceedings of Digest West Siberian Petroleum Conference 'Innovative Technologies in Oil Industry'*. pp. 115–119.
5. Kanevskaya R.D. (1999) *Matematicheskoe modelirovanie razrabotki mestorozhdeniy nefi i gaza s primeneniem gidravlicheskogo razryva plasta* [Mathematical modeling of the oil and gas field development using a hydraulic fracturing]. Moscow: Nedra.
6. Rozenberg M.D., Kundin S.A. (1976) *Mnogofaznaya mnogokomponentnaya fil'tratsiya pri dobyche nefi i gaza* [Multiphase multicomponent filtration in oil and gas production]. Moscow: Nedra.
7. Krichloy G.B. (1979) *Sovremennaya razrabotka neftyanykh mestorozhdeniy. Problemy modelirovaniya* [Modern development of oil fields. Modeling problems]. Moscow: Nedra.
8. Aziz H., Settari E. (1982) *Matematicheskoe modelirovanie plastovykh sistem* [Mathematical modeling of reservoir systems]. Moscow: Nedra.
9. Masket M. (1953) *Fizicheskie osnovy tekhnologii dobychi nefi* [Physical foundations of the oil production technology]. Moscow: Gostoptekhizdat.
10. Peaceman D.W. (1983) Interpretation of well-block pressures in numerical reservoir simulation with nonsquare grid blocks and anisotropic permeability. *SPE Journal*. 23(3). pp. 531–543. DOI: 10.2118/10528-PA.
11. Economides M.J., Martin A.N. (2010) How to decide between horizontal transverse, horizontal longitudinal and vertical fractured completion. *Annual Technical Conference and Exhibition: Society of Petroleum Engineers*. pp. 1–18. DOI: 10.2118/134424-MS.
12. Instruction of "TomskNIPNeft" on the maintenance of the rating of production drilling and sidetracking. No. ПИ-01.05 И-0016 ЮИ-068.
13. Donskoy S.E. (2016) Draft order "Rules for preparation of the technical projects on the development of hydrocarbon deposits".
14. Hamidullin M.R. (2016) Numerical simulation of single-phase fluid flow to a horizontal well with fractures of a multistage hydraulic fracturing. *Scientific notes of Kazan University*. 158. pp. 287–301.
15. Rock Flow Dynamics (2016): *tNavigator*. Flow simulator Technical manual.
16. Richardson J., Kerver J., Hafford J., Osoba J. (1958) Laboratory determination of relative permeability. *Trans. AIME*. 195(4-5).
17. Balin D.V., Semenova T.V. (2017) O vliyani protsessa avto-GRP na velichinu nakoplennoy dobychi nefi [Impact of injection induced fracturing on cumulative oil production]. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Neft' i gaz – Oil and Gas Studies*. 1. pp. 43–47. DOI: 10.31660/0445-0108-2017-1-43-47.
18. Dongjin Xu, Ruiquan Liao, Zhiwen Li, Zhicheng Zhao, Fan Zhang (2015) Research on productivity for multi-stage fracturing of horizontal wells. *Chemical Engineering Transactions*. 46. pp. 1189–1194. DOI: 10.3303/CET1546199.
19. Dongjin Xu, Ruiquan Liao, Zhiwen Li, Zhicheng Zhao, Fan Zhang (2016) A new model to predict the unsteady production of fractured horizontal wells. *Sains Malaysiana*. 45(10). pp. 1579–1587. DOI: 10.1016/j.petrol.2016.12.037.

Received: October 8, 2018

УДК 539.3+539.4

DOI 10.17223/19988621/58/8

В.А. Микушина, И.Ю. Смолин

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДЕФОРМИРОВАНИЯ И РАЗРУШЕНИЯ ПОРИСТОЙ АЛЮМООКСИДНОЙ КЕРАМИКИ НА МЕЗОУРОВНЕ¹

Представлены результаты моделирования деформирования и разрушения мезообъемов пористой алюмооксидной керамики в условиях растяжения. Пористая структура учитывалась явным образом на основе экспериментальных данных, полученных методом электронной микроскопии. Для описания механического поведения предложена изотропная упруго-хрупкая модель деградирующей среды. Расчет поврежденности производится с учетом вида напряженного состояния. Показано, что картины разрушения на мезоуровне существенно зависят от формы и взаимного расположения пор. Полученные эффективные упругие и прочностные характеристики материала согласуются с экспериментальными данными.

Ключевые слова: численное моделирование, пористая керамика, поврежденность, мезоуровень, разрушение, эффективные свойства.

В последнее время пористые керамические материалы вызывают особый интерес многих исследователей благодаря своим физико-механическим свойствам: высокая коррозионная и химическая стойкость, хорошая биологическая совместимость с костной тканью, высокая механическая прочность и др. Изделия из пористой керамики применяются в различных областях техники и технологиях. Например, их используют при изготовлении теплоизоляционных изделий, биоимплантов в эндопротезировании, носителей катализаторов в химической промышленности и фильтров [1, 2]. Наличие пористой структуры в керамике оказывает влияние на ее упругие, прочностные и функциональные свойства. Например, за счет регулирования пористости в материале биоимплантата удастся снизить его упругие свойства до свойств костной ткани, а также обеспечить прорастание костной ткани внутрь имплантата. Размеры и форма пор важны при использовании керамики в качестве носителей катализаторов. Поскольку поры являются концентраторами напряжений в материале, которые ведут к снижению прочностных свойств, то учет особенности поровой структуры очень важен при оценке прочностных свойств керамических материалов. В связи с этим задача исследования связи пористой структуры и механических свойств пористых материалов и изделий из них является актуальной.

В настоящее время для решения этой задачи широко используются методы компьютерного моделирования. Они позволяют сэкономить средства при проведении исследований и получить ответы на некоторые вопросы, когда одними экспериментами не обойтись. Есть примеры использования компьютерного моделирования, воспроизводящего полные условия эксперимента, для определения параметров сложных математических моделей [3]. Существует разное количество

¹ Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 годы, направление III.23 (численные расчеты) и при поддержке Программы повышения конкурентоспособности ТГУ (разработка физико-математической модели).

математических моделей для описания деформации и разрушения материалов на разных масштабных уровнях, но поскольку все модели имеют ограниченную область применения, поэтому представляет интерес разработка и исследование новых моделей [4]. Для численного изучения особенностей деформации и разрушения структурно-неоднородных материалов на мезоуровне применяются модели физической мезомеханики [5–11]. В последнее время на макро- и мезоуровнях широко используются модели механики рассеянных повреждений для описания разрушения в рамках многоуровневого подхода [12].

Известно, что для хрупких материалов прочность на сжатие существенно превышает прочность на растяжение. И при сложном напряженном состоянии разрушение зарождается именно в локальных областях растяжения. Одним из основных и наиболее простых методов экспериментальных исследований керамических материалов является испытание на трехточечный изгиб. Поскольку в условиях трехточечного изгиба часть образца находится в состоянии сжатия, а другая – под действием растягивающих напряжений, наиболее опасных для пористых керамик, то особый интерес представляет изучение областей растяжения.

Целью работы является численное исследование деформации и разрушения керамики на основе Al_2O_3 с пористой структурой на мезоуровне при растяжении с применением упруго-хрупкой модели, которая учитывает накопление повреждений, вызывающее деградацию упругих свойств.

Постановка задачи

Пористая структура мезообъемов алюмооксидной керамики была взята из экспериментальных данных, описанных работе [13]. Пористость исследуемых мезообъемов учитывалась явно и составляла 33, 26 и 17 %. Для каждого значения пористости были выбраны три различных фотографии одной пористости. По изображениям поровых структур, полученных с помощью растрового электронного микроскопа, были построены компьютерные геометрические модели структуры мезообъемов (рис. 1). Размеры мезообъемов на рис. 1 составляют 100×100 мкм. Для каркаса были приняты физико-механические характеристики, соответствующие беспористому Al_2O_3 : плотность $3,98 \text{ г/см}^3$, объемный модуль упругости 251 ГПа, модуль сдвига 163 ГПа [14]. В порах были заданы характеристики упругой среды со значениями упругих модулей на 3 порядка ниже, чем в каркасе.

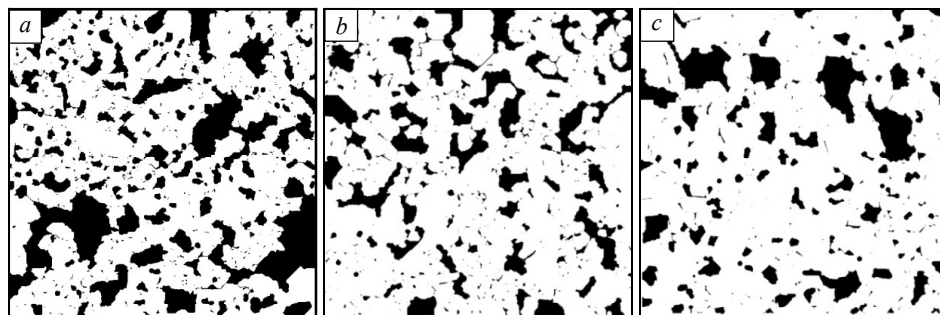


Рис. 1. Компьютерные модели керамической структуры с пористостью 33 (a), 26 (b) и 17 % (c)

Fig. 1. Computer models of the ceramic structure with a porosity of (a) 33 %, (b) 26 %, and (c) 17 %

Механическое поведение материала описывается системой уравнений механики сплошной среды, которая включает в себя фундаментальные законы сохранения, геометрические соотношения и определяющие уравнения.

В рамках лагранжева подхода к описанию сплошной среды фундаментальные законы сохранения массы, импульса и энергии имеют вид

$$\rho_0 V_0 = \rho V; \quad (1)$$

$$\rho \frac{dv_i}{dt} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x^j}; \quad (2)$$

$$\frac{dE}{dt} = \frac{1}{\rho} \sigma_{ij} \frac{d\varepsilon_{ij}}{dt}, \quad (3)$$

где ρ_0 – начальное значение плотности, V_0 – начальный элементарный объем; ρ – текущее значение плотности материала, V – текущий элементарный объем; v_i – компоненты вектора скорости; σ_{ij} , ε_{ij} – компоненты тензора напряжения и тензора деформации соответственно; E – удельная внутренняя энергия на единицу массы.

Геометрические соотношения в скоростной форме имеют вид

$$\dot{\varepsilon}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x^j} + \frac{\partial v_j}{\partial x^i} \right); \quad (4)$$

$$\dot{\omega}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_i}{\partial x^j} - \frac{\partial v_j}{\partial x^i} \right), \quad (5)$$

где $\dot{\varepsilon}_{ij}$ – компоненты тензора скорости деформации; $\dot{\omega}_{ij}$ – компоненты тензора скорости вращения.

Для описания механического поведения пористой керамики на мезоуровне будем использовать определяющие соотношения изотропной упруго-хрупкой повреждаемой среды. В основе этой модели лежат уравнения гипотермостатичности (связь скоростей напряжений и деформаций) для изотропного материала:

$$\dot{P} = -K\dot{\theta}, \dot{s}_{ij} = 2G \left[\dot{\varepsilon}_{ij} - \frac{1}{3}\dot{\theta}\delta_{ij} \right] - s_{ik}\dot{\omega}_{kj} + s_{kj}\dot{\omega}_{ik}, \quad (6)$$

где $P = -1/3\sigma_{ii}$ – давление; K – объемный модуль упругости; $\theta = \varepsilon_{ii}$ – объемная деформация; s_{ij} – компоненты девиатора тензора напряжений; G – модуль сдвига; δ_{ij} – символ Кронекера; $s_{ik}\dot{\omega}_{kj} + s_{kj}\dot{\omega}_{ik}$ – поправка на поворот, которая возникает при использовании коротационной производной Яуманна к тензору напряжений; точка над символом означает материальную производную по времени. В этих уравнениях принято разложение тензора напряжения на шаровую и девиаторную части:

$$\sigma_{ij} = -P\delta_{ij} + s_{ij}. \quad (7)$$

В рамках модели упруго-хрупкой повреждаемой среды упругие модули сдвига и упругости деградируют с ростом повреждений в соответствии с формулами [15]:

$$G = G_0(1-D), \quad K = K_0(1-D), \quad (8)$$

где G_0 и K_0 – модули сдвига и объемной упругости неповрежденного материала; D – поврежденность.

Для описания разного сопротивления среды в условиях растяжения и сжатия, характерного для таких хрупких материалов как керамика, в модели накопления повреждений имеет смысл использовать напряжения модели материала Друккера – Прагера (среды с внутренним трением), а также разные критические значения напряжений, в зависимости от вида девиаторного напряженного состояния, описываемого параметром Лоде – Надаи. Поэтому кинетическое уравнение для эволюции (накопления) повреждений D примем в следующем виде [16–18]:

$$D(t) = \int_{t_0}^t \frac{H(\mu_\sigma)(\sigma - \sigma_0^c)^2 + (1 - H(\mu_\sigma))(\sigma - \sigma_0^t)^2}{\sigma_*^2 [H(\mu_\sigma)t^c + (1 - H(\mu_\sigma))t^t]} dt. \quad (9)$$

Здесь $H(\mu_\sigma)$ – функция Хевисайда; $\mu_\sigma = 2 \frac{S_2 - S_3}{S_1 - S_3} - 1$ – параметр Лоде – Надаи;

S_1, S_2, S_3 – главные значения девиатора тензора напряжений; $\sigma = -\alpha P + \tau$ – напряжения Друккера – Прагера; α – коэффициент внутреннего трения; $\tau = (\frac{1}{2} s_{ij} s_{ij})^{\frac{1}{2}}$ – интенсивность сдвиговых напряжений; σ_0^c, σ_0^t – начальные значения напряжений на упругой стадии, по достижению которых в материале каркаса начинается накопление повреждений в областях сжатия и растяжения соответственно, причем $\sigma_0^t \ll \sigma_0^c$; t^c, t^t – характерные времена процесса разрушения в условиях сжатия и растяжения соответственно; $\sigma_* = \sigma_{0*}(1.01 + \mu_\sigma)^2$ – параметр модели, определяющий скорость накопления повреждений. Начальные значения напряжений σ_0^c, σ_0^t позволяют учесть неявно наличие трещин и пор более мелкого масштаба.

В качестве критерия разрушения принимается условие, когда локальное значение поврежденности становится равным единице. При описании разрушения структурно-неоднородных сред важно учитывать возможность локальных зон, разрушенных по определенным механизмам, продолжить сопротивляться нагрузке [15]. Для этого при моделировании механического отклика мезообъемов пористой керамики, в которых выполняется критерий разрушения, расчет напряжений производится с учетом того, в каких условиях деформирования находится расчетная ячейка. Если расчетная ячейка находится в условиях всестороннего растяжения, то значения напряжений в ней приравнялись нулю, т.е. материал в ней не сопротивляется растяжению. Если же расчетная ячейка находится в условиях всестороннего сжатия, то напряжения в ней рассчитываются по гипотезе закона с использованием текущего значения деградированного модуля упругости.

Для компьютерного исследования процессов деформирования и разрушения в исследуемых мезообъемах использовали конечно-разностный численный метод решения дифференциальных уравнений механики деформируемого твердого тела [19]. Моделирование проводилось в двумерной постановке в условиях плоской деформации. Рассматривался случай одноосного растяжения.

Для анализа результатов используем усредненные диаграммы напряжение-деформация. По этим диаграммам можно определить эффективные значения упругих модулей и прочности исследуемого пористого материала. Поскольку у нас среда не обладает периодической структурой, то для определения ее эффективных свойств применяются методы теории случайных функций [15].

Для определения эффективных упругих модулей пористого материала по результатам моделирования мезообъемов в условиях одноосного нагружения при плоском деформированном состоянии была разработана следующая методика.

В соответствии с общей теорией расчета эффективных характеристик структурно-неоднородных материалов (композитов) использовались усредненные по объему значения полей напряжений и деформаций. Например, для компоненты тензора напряжений σ_{ij} усредненные значения определяются по формуле

$$\langle \sigma_{ij} \rangle = \frac{1}{V} \int_V \sigma_{ij} dV, \quad (10)$$

где V – объем, по которому производится усреднение.

Далее, используя соотношения между давлением и объемной деформацией (первыми инвариантами тензоров напряжений и деформаций)

$$P = -K\varepsilon, \quad (11)$$

и интенсивностями напряжений и деформаций

$$\sigma_i = 3G\varepsilon_i, \quad (12)$$

эффективные значения модулей объемной упругости и сдвига определялись через параметры линейной аппроксимации зависимостей

$$\langle P \rangle = -K \langle \varepsilon \rangle; \quad (13)$$

$$\langle \sigma_i \rangle = 3G \langle \varepsilon_i \rangle, \quad (14)$$

где ε – объемная деформация, σ_i – интенсивность напряжения, ε_i – интенсивность деформации.

Для определения эффективного значения модуля Юнга было использовано соотношение между средним значением компоненты тензора напряжений вдоль оси нагружения и значением условной (инженерной) деформации вдоль той же оси для условия плоской деформации:

$$E = \langle \sigma_{xx} \rangle \frac{(1 - \nu^2)}{\langle \varepsilon_{xx} \rangle}, \quad (13)$$

где σ_{xx} – значение напряжения вдоль оси нагружения; ε_{xx} – значение деформации удлинения вдоль оси нагружения.

Эффективное значение коэффициента Пуассона определялось из соотношения

$$\langle \nu \rangle = \frac{\langle \varepsilon_{yy} \rangle}{\langle \varepsilon_{yy} \rangle - \langle \varepsilon_{xx} \rangle}, \quad (14)$$

выведенного для средних значений компонент тензора деформаций в условиях одноосного нагружения при плоском деформированном состоянии. При моделировании рассчитанное по формуле (16) значение эффективного коэффициента Пуассона менялось в ходе деформации. Поэтому за среднее значение принималось значение, к которому стремилась зависимость $\langle \nu \rangle (\langle \varepsilon_{xx} \rangle)$.

Результаты моделирования и их обсуждение

Усредненные по мезообъему кривые нагружения представлены на рис. 2, а. Они имеют характерный для хрупких материалов вид. Видно, что с уменьшением пористости нелинейно возрастает модуль Юнга и прочность материала. Опреде-

ленные из диаграмм, представленных на рис. 2, а, значения модуля упругости E и прочности σ представлены в табл. 1. Можно отметить, что вычисленные эффективные значения прочности из расчетов хорошо согласуются с экспериментальными значениями, представленными в работе [13].

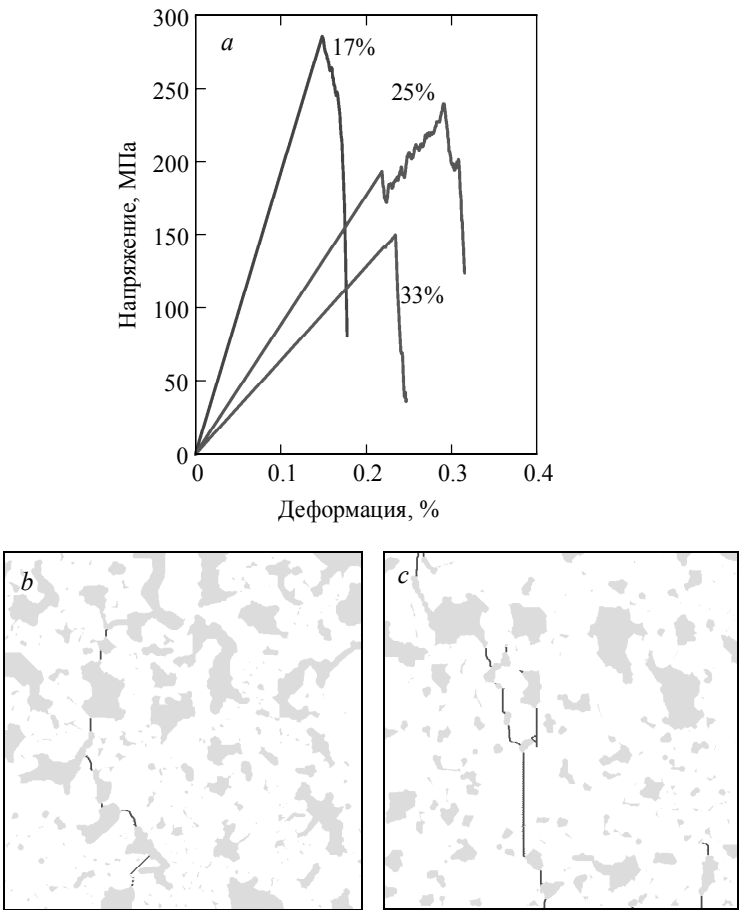


Рис. 2. Результаты моделирования растяжения на мезоуровне: кривые напряжение – деформация с указанием пористости (а), картины разрушения в мезообъемах керамики с пористостью 25 % (b) и 17 % (c)

Fig. 2. The results of mesoscale modeling of the tension: (a) stress-deformation diagrams with indicated porosity; fracture patterns in the mesovolumes of ceramics with porosity of (b) 25 and (c) 17 %

Таблица 1

Вычисленные физико-механические характеристики керамики на основе Al_2O_3

Пористость, %	Прочность при растяжении σ , МПа	Модуль упругости E , ГПа	Коэффициент Пуассона, ν
33±0,7	150±13	57±9	0,35±0,02
26±0,6	236±7	85±13	0,21±0,02
17±1	286±17	184±9	0,22±0,02

Картины разрушения для двух мезообъемов представлены на рис. 2, *b*, *c*. Распределения напряжений модели материала Друккера – Прагера для мезообъема с пористостью 17 % представлены на рис. 3. Анализируя эти результаты, можно отметить, что трещины образуются возле сильных концентраторов напряжений, обусловленных формой и расположением пор. Затем трещины растут в направлении, перпендикулярном оси приложения растягивающей нагрузки (ось нагружения расположена горизонтально), что характерно для хрупких материалов.

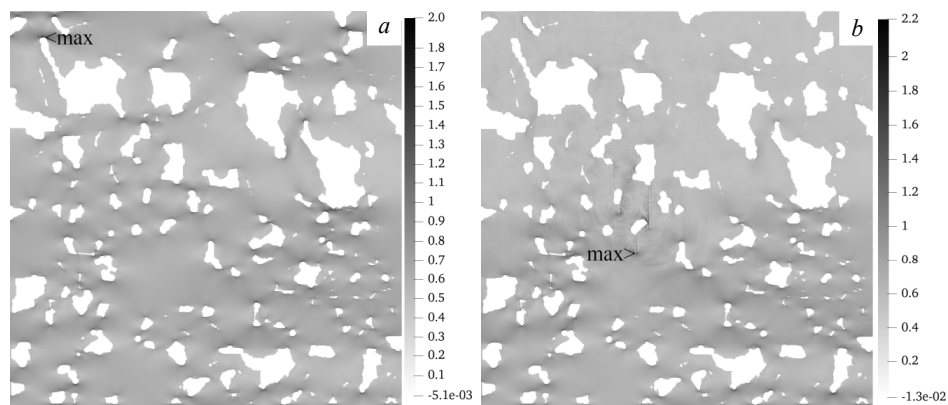


Рис. 3. Распределение напряжений Друккера – Прагера (ГПа) в мезообъеме керамики с пористостью 17 %: в момент зарождения первой трещины (*a*), при распространении вертикальной трещины (*b*). Область с максимальным значением отмечена угловой скобкой и знаком max

Fig. 3. Distribution of the Drucker-Prager stress (GPa) in the mesovolume of ceramics with porosity of 17 %: (*a*) at the instant of the first crack nucleation and (*b*) during a vertical crack propagation. The region containing a maximum value is marked by the angle bracket and label “max”

Заключение

Выполнено моделирование деформирования и разрушения мезообъемов пористой алюмооксидной керамики в условиях одноосного растяжения. Для описания механического поведения предложена изотропная упруго-хрупкая модель деградирующей среды. Расчет поврежденности производится с учетом вида напряженного состояния. На основе проведенных расчетов проанализировано влияние структуры пористой керамики на характер локальных разрушений в мезообъемах материала, а также на макроскопическую диаграмму деформирования. Разработана соответствующая методика для определения эффективных упругих модулей пористого материала по результатам моделирования мезообъемов в условиях одноосного нагружения при плоском деформированном состоянии.

Показано, что наличие сильных концентраторов напряжений определяет место зарождения трещин и влияет на их распространение в моделируемых мезообъемах.

Полученные из расчетов значения прочности и модуля упругости хорошо согласуются с экспериментальными значениями для всех значений пористости. Однако стоит отметить, что разброс этих значений как в эксперименте, так и в расчетах достаточно велик. Этот разброс результатов вызван наличием структурных неоднородностей в образцах и их влиянием на механические характеристики.

ЛИТЕРАТУРА

1. Митрошин А.Н., Космынин Д.А. Керамика как материал выбора в эндопротезировании коленного сустава // Изв. вузов. Поволжский регион. Медицинские науки. 2016. № 1(37). С. 98–110.
2. Лукин Е.С., Макаров Н.А., Козлов А.И. и др. Современная оксидная керамика и области ее применения // Конструкции из композиционных материалов. 2007. № 1. С. 3 – 13.
3. Savchenko N.L., Sevostyanova I.N., Sablina T.Yu., Gomze L., Kulkov S.N. The influence of porosity on the elasticity and strength of alumina and zirconia ceramics // AIP Conf. Proc. 2014. V. 1623. P. 547–550. DOI: 10.1063/1.4899003.
4. Микушина В.А., Смолин И.Ю. Моделирование деформации и разрушения пористой керамики с использованием разных критериев разрушения // Труды Томского государственного университета. Серия физико-математическая: Актуальные проблемы современной механики сплошных сред и небесной механики: VI Международная молодежная научная конференция. Томск, 27–29 ноября 2017 г. / под ред. М.Ю. Орлова. Томск: Изд-во Том. ун-та, 2018. Т. 302. С. 188–192.
5. Meille S., Lombardi M., Chevalier J., Montanaro L. Mechanical properties of porous ceramics in compression: On the transition between elastic, brittle, and cellular behavior // J. Eur. Ceram. Soc. 2012. V. 32, P. 3959–3967. DOI: 10.1016/j.jeurceramsoc.2012.05.006.
6. Le Corre V., Brusselle-Dupend N., Moreaud M. Numerical modeling of the effective ductile damage of macroporous alumina // Mech. Mater. 2017. V. 114. P. 161–171. DOI: 10.1016/j.mechmat.2017.08.002
7. Smolin A.Yu., Roman N.V., Konovalenko Ig.S., Eremina G.M., Buyakova S.P., Psakhie S.G. 3D simulation of dependence of mechanical properties of porous ceramics on porosity // Eng. Fract. Mech. 2014. V. 130. P. 53–64. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2014.04.001.
8. Mikushina V.A., Smolin I.Yu., Sidorenko Yu.N. Numerical modeling and prediction of mechanical properties of ceramic composite // J. Phys.: Conf. Ser. 2017. V. 919. P. 012013–1–012013-5. DOI: 10.1088/1742-6596/919/1/012013.
9. Smolin I.Yu., Makarov P.V., Eremin M.O., Matyko K.S. Numerical simulation of mesomechanical behavior of porous brittle materials // Proc. Struct. Integrity. 2016. V. 2. P. 3353–3360. DOI: 10.1016/j.prostr.2016.06.418.
10. Romanova V.A., Soppa E., Schmauder S., Balokhonov R.R. Meso-mechanical analysis of the elasto-plastic behavior of a 3D composite-structure under tension // Comput. Mech. 2005. V. 36. P. 475–483. DOI: 10.1007/s00466-005-0682-5.
11. Panin A.V., Romanova V.A., Balokhonov R.R., Perevalova O.B., Sinyakova E.A., Emelyanova O.S., Leontieva-Smirnova M.V., Karpenko N.I. Mesoscopic surface folding in EK-181 steel polycrystals under uniaxial tension // Phys. Mesomech. 2012. V. 15. P. 94–103. DOI: 10.1134/S1029959912010109.
12. Волегов П.С., Грибов Д.С., Трусов П.В. Поврежденность и разрушение: классические континуальные теории // Физич. мезомех. 2015. Т. 18. №4. С. 68–86.
13. Kulkov A.S., Smolin I.Yu., Mikushina V.A. Investigation of mechanical response of Al_2O_3 ceramic specimens to loading with consideration for their structural features // AIP Conf. Proc. 2018. V. 2051. P. 020162-1–020162-4. DOI:10.1063/1.5083405.
14. Properties: Alumina – Aluminium Oxide – Al_2O_3 – A Refractory Ceramic Oxide. URL: <https://www.azom.com/properties.aspx?ArticleID=52> (дата обращения: 13.12.2018).
15. Вильдеман В.Э., Соколкин Ю.В., Ташкинов А.А. Механика неупругого деформирования и разрушения композиционных материалов. М.: Наука. Физматлит, 1997. 288 с.
16. Смолин И.Ю., Еремин М.О., Макаров П.В., Буякова С.П., Евтушенко Е.П., Кульков С.Н. Численное моделирование механического поведения модельных хрупких пористых материалов на мезоуровне // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2013. № 5(25) С.78–90.
17. Еремин М.О. Применение метода механической аналогии для численного моделирования разрушения керамических композитов $\text{ZrO}_2\text{--Al}_2\text{O}_3$ в трехмерной постановке // Физич. мезомех. 2015. Т. 18. № 3. С. 105–112.

18. Смолин И.Ю., Макаров П.В., Кульков А.С., Еремин М.О., Бакеев Р.А. Режимы с обострением при разрушении образцов горных пород и элементов земной коры // Физич. мезомех. 2016. Т. 19. № 6. С. 77–85.
19. Wilkins M. L. Computer Simulation of Dynamic Phenomena. Berlin: Springer-Verlag, 1999. 246 p.

Статья поступила 06.02.2018 г.

Mikushina V.A., Smolin I.Yu. (2019) NUMERICAL MODELING OF THE DEFORMATION AND FRACTURE OF A POROUS ALUMINA CERAMICS AT MESOSCALE *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 58. pp. 99–108

DOI 10.17223/19988621/58/8

Keywords: numerical modeling, porous ceramics, damage, mesoscale, fracture, effective properties.

The deformation and fracture of the mesovolumes of porous alumina ceramics during uniaxial tension were numerically simulated. The porous structure of the mesovolumes was obtained from the electron microscopy data and taken into account explicitly in the modeling process. The porosity of the mesovolumes was equal to 33, 26, and 17 %. Three different computer models of the mesovolumes of the same porosity were taken for each considered value of porosity. The modeling was implemented using the finite-difference method in a two-dimensional statement under plane-strain conditions. The constitutive equations accounting for damage accumulation which leads to a degradation of elastic properties were adopted. The equation defining damage accumulation kinetics was based on the calculation of effective stress of the Drucker-Prager material model with consideration for a stress state type (the Lode parameter). The mesoscopic fracture was described using the critical damage criterion. After meeting the fracture criterion, the stresses were set equal to zero, and the material ceased to resist tension but not compression. Based on the calculated results, the effect of the porous ceramic structure on the local fracture characteristics in the mesovolumes of material as well as on the macroscopic deformation diagram was analyzed. The presence of strong stress concentrators in the mesovolumes determined crack's nucleation cite and affected their propagation within the modeled mesovolumes. The calculated effective elastic and strength characteristics of materials are in a good agreement with experimental data.

Financial support. The work was carried out in the framework of the Program of Fundamental Research of the State Academies of Sciences for 2013–2020, line of research III.23 (numerical calculations), and supported by Tomsk State University Competitiveness Improvement Program (development of physical and mathematical model).

MIKUSHINA Valentina Alekseevna (Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: Mikushina_93@mail.ru

SMOLIN Igor Yur'evich (Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: smolin@ispms.ru

REFERENCES

1. Mitroshin A.N., Kosmynin D.A. (2016) Keramika kak material vybora v endoprotezirovanii kolennogo sustava [Ceramics as a material of choice in endoprosthesis replacement of knee joints]. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Povolzhskiy region. Meditsinskie nauki – University proceedings. Volga region. Medical sciences.* 1. pp. 98–110.
2. Lukin E.S., Makarov N.A., Kozlov A.I., et al. (2007) Sovremennaya oksidnaya keramika i oblasti ee primeneniya [Novel oxide ceramics and fields of its application]. *Konstruktsii iz kompozitsionnykh materialov – Composite materials constructions.* 1. pp. 3–13.
3. Savchenko N.L., Sevostyanova I.N., Sablina T.Yu., Gomze L. Kulkov S.N. (2014) The influence of porosity on the elasticity and strength of alumina and zirconia ceramics. *AIP Conference Proceedings.* 1623. pp. 547–550. DOI: 10.1063/1.4899003.

4. Mikushina V.A., Smolin I.Yu. (2017) Modelirovanie deformatsii i razrusheniya poristoy keramiki s ispol'zovaniem raznykh kriteriev razrusheniya [Simulation of deformation and failure of porous ceramics using different fracture criteria]. *Proceedings of Tomsk State University. Physical and Mathematical Series*. 302. pp. 188–192.
5. Meille S., Lombardi M., Chevalier J., Montanaro L. (2012) Mechanical properties of porous ceramics in compression: On the transition between elastic, brittle, and cellular behavior. *Journal of the European Ceramic Society*. 32. pp. 3959–3967. DOI: 10.1016/j.jeurceramsoc.2012.05.006.
6. Le Corre V., Brusselle-Dupend N., Moreaud M. (2017) Numerical modeling of the effective ductile damage of macroporous alumina. *Mechanics of Materials*. 114. pp. 161–171. DOI: 10.1016/j.mechmat.2017.08.002.
7. Smolin A.Yu., Roman N.V., Konovalenko I.S., Eremina G.M., Buyakova S.P., Psakhie S.G. (2014) 3D simulation of dependence of mechanical properties of porous ceramics on porosity. *Engineering Fracture Mechanics*. 130. pp. 53–64. DOI: 10.1016/j.engfracmech.2014.04.001.
8. Mikushina V.A., Smolin I.Yu., Sidorenko Yu.N. (2017) Numerical modeling and prediction of mechanical properties of ceramic composite. *Journal of Physics: Conference Series*. 919. pp. 012013-1–012013-5. DOI: 10.1088/1742-6596/919/1/012013.
9. Smolin I.Yu., Makarov P.V., Eremin M.O., Matyko K.S. (2016) Numerical simulation of mesomechanical behavior of porous brittle materials. *Procedia Structural Integrity*. 2. pp. 3353–3360. DOI: 10.1016/j.prostr.2016.06.418.
10. Romanova V.A., Soppa E., Schmauder S., Balokhonov R.R. (2005) Meso-mechanical analysis of the elasto-plastic behavior of a 3D composite-structure under tension. *Computational Mechanics*. 36. pp. 475–483. DOI: 10.1007/s00466-005-0682-5.
11. Panin A.V., Romanova V.A., Balokhonov R.R., Perevalova O.B., Sinyakova E.A., Emelyanova O.S., Leontieva-Smirnova M.V., Karpenko N.I. (2012) Mesoscopic surface folding in EK-181 steel polycrystals under uniaxial tension. *Physical Mesomechanics*. 15. pp. 94–103. DOI: 10.1134/S1029959912010109.
12. Volegov P.S., Gribov D.S., Trusov P.V. (2017) Damage and fracture: Classical continuum theories. *Physical Mesomechanics*. 20. pp. 157–173. DOI: 10.1134/S1029959917020060.
13. Kulkov A.S., Smolin I.Yu., Mikushina V.A. (2018) Investigation of mechanical response of Al_2O_3 ceramic specimens to loading with consideration for their structural features. *AIP Conference Proceedings*. 2051. pp. 020162-1–020162-4. DOI: 10.1063/1.5083405.
14. Properties: Alumina – Aluminium Oxide – Al_2O_3 – A Refractory Ceramic Oxide. Access mode: <https://www.azom.com/properties.aspx?ArticleID=52>.
15. Vil'deman V.E., Sokolkin Yu.V., Tashkinov A.A. (1997) *Mekhanika neuprugogo deformirovaniya i razrusheniya kompozitsionnykh materialov* [Mechanics of inelastic deformation and failure of composite materials]. Moscow: Nauka.
16. Smolin I.Yu., Eremin M.O., Makarov P.V., Buyakova S.P., Kulkov S.N., Evtushenko E.P. (2013) Chislennoe modelirovanie mekhanicheskogo povedeniya model'nykh khrupkikh poristyykh materialov na mezuorovne [Numerical modelling of mechanical behaviour of model brittle porous materials at mesoscale]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mehanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 5(25). pp. 78–90.
17. Eremin M.O. (2016) Numerical simulation of fracture of $\text{ZrO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ ceramic composites. *Physical Mesomechanics*. 19(4). pp. 452–458. DOI: 10.1134/S1029959916040111.
18. Smolin I.Yu., Makarov P.V., Kulkov A.S., Eremin M.O., Bakeev R.A. (2018) Blow-up modes in fracture of rock samples and earth's crust elements. *Physical Mesomechanics*. 21(4). pp. 297–304. DOI: 10.1134/S1029959918040033.
19. Wilkins M.L. (1999) *Computer Simulation of Dynamic Phenomena*. Berlin: Springer-Verlag.

Received: February 8, 2018

УДК 620.17
DOI 10.17223/19988621/58/9

Е.Н. Москвичев, В.А. Скрипняк, В.В. Каракулов, Д.В. Лычагин

ВЛИЯНИЕ МИКРОСТРУКТУРНЫХ ИЗМЕНЕНИЙ ПРИ ЦИКЛИЧЕСКОМ РИФЛЕНИИ ПРЕССОВАНИЕМ НА МЕХАНИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ МАГНИЕВОГО СПЛАВА Mg–Mn–Ce¹

В представленной экспериментальной работе проведено исследование механических свойств и особенностей механического поведения магниевого сплава системы Mg–Mn–Ce, после обработки методом циклического прессования рифлением, при испытаниях на растяжение. Измельчение среднего размера зерна материала с 9 до 2.5 мкм привело к увеличению предела текучести на 30 %, а предела прочности – на 17 %. Изменения структуры также способствуют активации дополнительных систем скольжения, что способствует улучшению предельной деформации до разрушения.

Ключевые слова: магниевые сплавы, интенсивная пластическая деформация, циклическое рифление прессованием, микроструктура, механические свойства.

Магниевые сплавы широко используются в современной автомобильной и аэрокосмической отраслях промышленности за счет своих высоких удельных механических свойств. Особый интерес представляют деформируемые магниевые сплавы системы Mg–Mn–Ce. Легирование церием позволяет повысить прочностные характеристики при повышенных температурах. В то же время содержание в магниевом сплаве марганца повышает коррозионную стойкость и обеспечивает хорошую пластичность.

В последнее время ведутся интенсивные исследования, нацеленные на улучшение комплекса механических свойств магниевых сплавов как за счет легирования и дисперсного упрочнения внедренными частицами, так и за счет измельчения размеров зерен, повышения однородности их распределения в объеме элементов конструкций [1, 2]. Методы интенсивной пластической деформации (ИПД) лежат в основе перспективных технологий получения проката магниевых сплавов с мелкозернистой и ультрамелкозернистой структурой [3–6].

В данной работе для измельчения структуры в магниевом сплаве Mg–Mn–Ce использован метод циклического рифления прессованием (ЦРП), относящийся к методам ИПД. Ранее данный метод применялся для повышения прочностных характеристик плоского листового проката алюминиевых сплавов, меди, низкоуглеродистых сталей, никеля, магния [7–9]. ЦРП позволяет за счет изменений структуры, улучшать прочностные и деформационные свойства листового проката различных размеров, ограниченных лишь производственными мощностями.

Целью данной работы было получение экспериментальных данных о влиянии изменений зеренной структуры магниевых сплавов Mg–Mn–Ce после циклического рифления прессованием на физико-механические свойства в квазистатических условиях нагружения.

¹ Работа выполнена в рамках Программы фундаментальных научных исследований государственных академий наук на 2013–2020 годы, направление III.23, при частичном финансовой поддержке РФФИ (проект №16-08-00037а) и гранта Президента Российской Федерации МК-2690.2017.8.

Материал

Исследовались структурные изменения в результате ЦРП в деформируемом магниевом сплаве Mg–Mn–Ce со следующим составом: Mn 1.3 %, Ce 0.2 %, Mg – остальное, в соответствии с ГОСТ 14957-76. Образцы с размерами 120×20×2 мм для обработки ЦРП вырезались из листового проката в отожженном состоянии вдоль направления проката.

Модификация структуры методом циклического рифления при прессовании

Для получения модифицированной зеренной структуры тонколистового проката магниевого сплава был использован метод циклического рифления прессованием, в процессе которого материал подвергается интенсивной сдвиговой деформации в условиях повышенного гидростатического давления.

ЦРП реализуется через обжатие плоского образца между двумя пресс-формами, выпрямление между двумя плоскими пресс-формами, сдвига образца на шаг рифления и повторное рифление с повторным выпрямлением. Принципиальная схема процесса представлена на рис. 1.

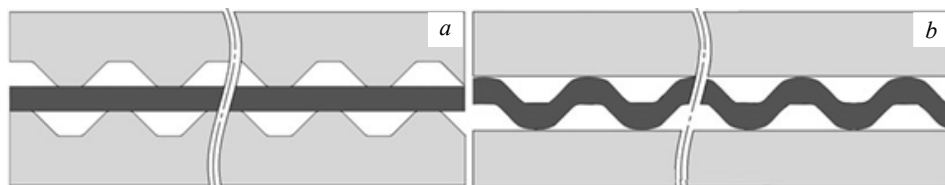


Рис. 1. Принципиальная схема циклического рифления прессованием: форма оснастки для рифления (а), форма оснастки для выпрямления (b)

Fig. 1. Basic scheme of a cyclic groove pressing: shape of the (a) grooving and (b) flattening equipment

Пластическая деформация происходит в основном в области сдвига, где эквивалентная деформация ε_{eff} достигает значения ~ 0.58 . Соответственно, после одного прессования и одного выпрямления тонколистового образца общая деформация составляет $\varepsilon_{\text{eff}} = \sim 1.16$. Нагружение ранее недеформированных зон достигается за счет поворота образца на 180° . При многократном прессовании накопление пластической деформации в образце оценивается с помощью соотношения: $\varepsilon_{\text{eff}} = \sim 1.16n$, где n – число циклов прессования с рифлением.

ЦРП ранее применялась для обработки алюминиевого сплава 1560 [10]. В результате моделирования были получены оценки эволюции напряженно-деформированного состояния образцов, сил, действующих в элементах пресс формы во всем диапазоне деформирования [11]. Сконструированная по результатам моделирования пресс-форма была изготовлена и применялась для обработки магниевого сплава, исследованного в данной работе.

Циклическое прессование образцов магниевого сплава Mg–Mn–Ce выполнялось при температуре прессования $(250 \pm 5)^\circ\text{C}$, времени выдержки образца в прессформе – 3 мин, скорости прессования – 10 мм/мин, количестве циклов – 3. Для минимизации трения в качестве смазки поверхностей образца и прессформ использовалась высокотемпературная смазка на основе дисульфида молибдена.

Микроструктурные изменения в результате циклического рифления при прессовании

Анализ структуры образцов в состоянии поставки и полученных после циклического рифления прессованием проводился методами оптической и электронной сканирующей микроскопии. Образцы для исследования зеренной структуры вырезались из образца электроэрозионным методом на установке DK7750 в направлении, нормальном плоскости заготовки. После механической шлифовки и полировки алмазными суспензиями с размерами частиц ~ 1 мкм, поверхность была протравлена 3 %-м раствором азотной кислоты в спирте. Структура анализировалась с использованием оптической микроскопии, размер зерна был определен методом измерения длин хорд по ГОСТ 5639-82.

Исследования зеренной структуры методом дифракции отраженных электронов (ДОЭ) проводили на электронном микроскопе Tescan Vega II LMU.

Зеренная структура магниевого сплава Mg–Mn–Ce в исходном состоянии состояла из равноосных зерен с размерами, имеющими нормальное распределение в диапазоне 2–20 мкм, со средним размером зерна 9 мкм (см. рис. 2, *a, c, e*).

Анализ структуры обработанных образцов показал, что в ходе рифления прессованием исходная равноосная зеренная структура претерпевает изменения. Средний размер зерна уменьшается от 9 мкм до 2.2 мкм, зерна имеют размеры в диапазоне от 0.5 до 5 мкм (рис. 2, *b, d, f*).

Подобные закономерности изменения параметров зеренной структуры в результате ИПД, наблюдались в магниевом сплаве AZ31 (MA 2) при близких степенях деформации, был получен численно близкий эффект уменьшения размера зерна [12, 13]. Это обстоятельство указывает на существование общих закономерностей эволюции зеренной структуры в магниевых сплавах при интенсивной пластической деформации.

Механическое поведение магниевого сплава после ЦРП

Для испытаний на растяжение из исходных заготовок электроэрозионным методом были вырезаны плоские образцы в виде лопаток, с размерами рабочей части $9.45 \times 2 \times 1.1$ мм. Испытания на растяжение проводились на универсальной электромеханической испытательной машине Instron 5948 при скорости деформации 10 с^{-1} и комнатной температуре. Испытания проводились в соответствии с ISO 6892-1.

Уменьшение средних размеров зерна магниевого сплава сопровождается ростом сопротивления пластическому течению, изменением величины деформационного упрочнения и предельных характеристик. На рис. 3, *a* показаны экспериментальные диаграммы напряжение – деформация, полученные при растяжении образцов сплава в состоянии поставки (кривая 1) и после ЦРП (кривая 2). Результаты свидетельствуют о повышении напряжения течения для сплава после трех циклов ЦРП. Условный предел текучести сплава в состоянии поставки составил (105 ± 5) МПа, предел кратковременной прочности – (273 ± 10) МПа, предельная деформация до разрушения – ~ 17 % (рис. 3, *a*). На рис. 3, *b* представлены зависимости коэффициента деформационного упрочнения $d\sigma_s / d\varepsilon_{eq}^p$ как функции пластической деформации.

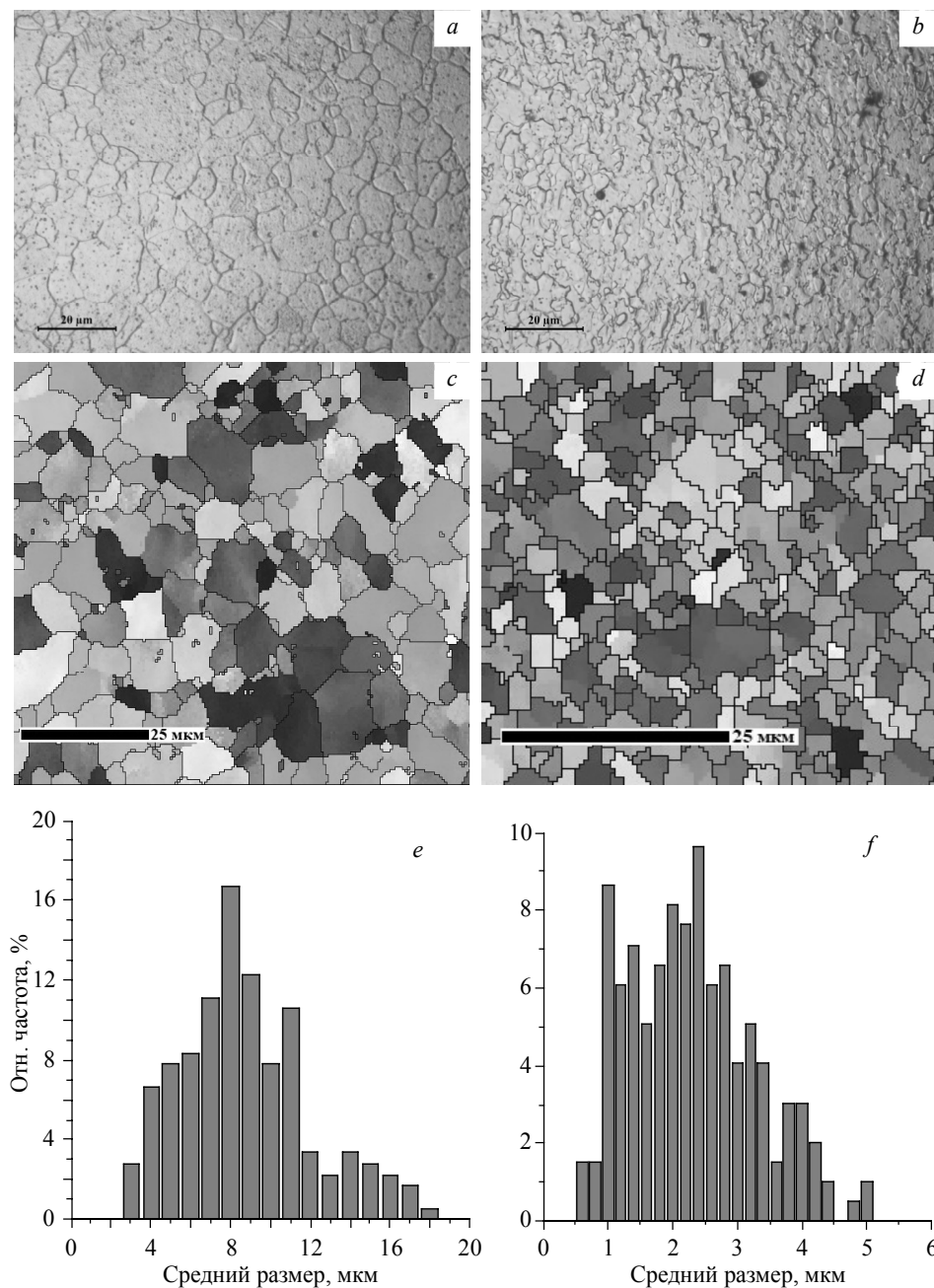


Рис. 2. Зеренная структура сплава Mg–Mn–Ce в состоянии поставки (*a, c, e*) и после трех циклов ЦРП (*b, d, f*): оптические снимки (*a, b*), анализ методом ДОЭ (*c, d*), гистограмма распределения зерен по размеру (*e, f*)

Fig. 2. Grained structure of Mg–Mn–Ce alloy at as-received state (*a, c, e*) and after three cycles of cyclic groove pressing (*b, d, f*): (*a, b*) optical micrographs, (*c, d*) EBSD analysis, and (*e, f*) distribution histogram according to a grain size

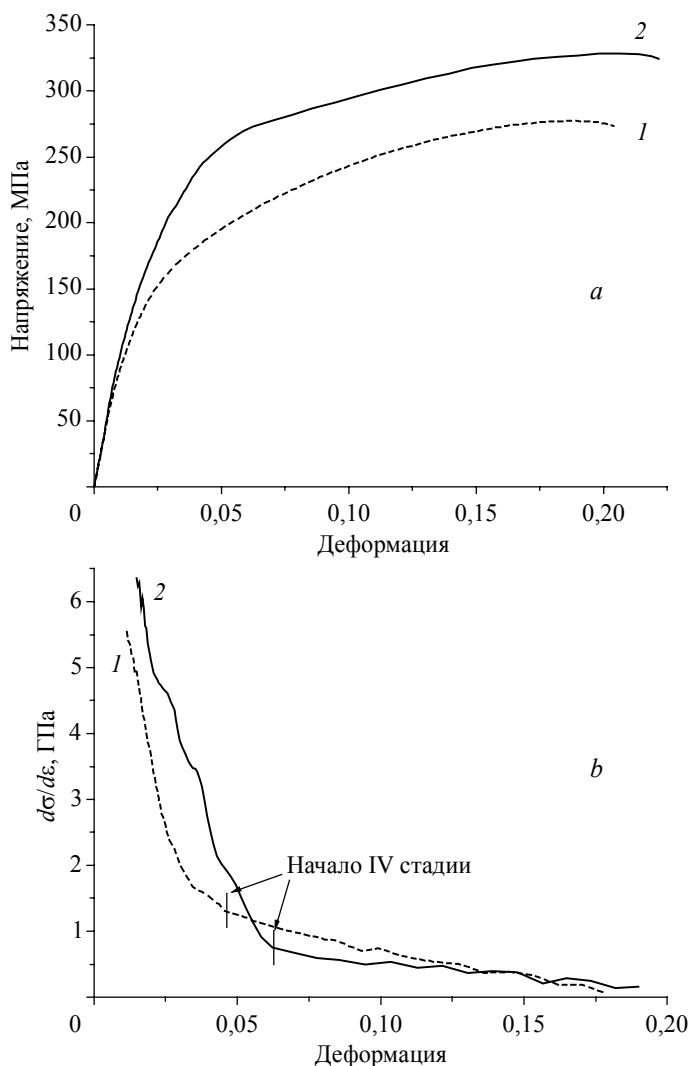


Рис. 3. Диаграммы истинное напряжение – истинная деформация (а): образец в состоянии поставки (кр. 1), образец после циклического рифления прессованием (кр. 2); зависимость коэффициента деформационного упрочнения от пластической деформации (б): образец в состоянии поставки (кр. 1); образец после трех циклов циклического рифления прессованием (кр. 2)

Fig. 3. True stress – true strain diagram for Mg–Mn–Ce alloy (a) at as-received state (curve 1) and after three cycles of cyclic groove pressing (curve 2); strain hardening coefficient as a function of the plastic strain of Mg–Mn–Ce alloy (b) at as-received state (curve 1) and after three cycles of cyclic groove pressing (curve 2)

Образцы из сплава Mg–Mn–Ce, подвергнутого циклическому рифлению прессованием, демонстрируют механическое поведение, отличное от поведения образцов в состоянии поставки. Произошло увеличение прочностных характери-

стик, так условный предел текучести возрос на $\sim 30\%$ и составил (140 ± 5) МПа, предел прочности увеличился на $\sim 17\%$ и составил (320 ± 10) МПа. Предельная деформация до разрушения составила $\sim 19\%$. Подобные изменения прочностных свойств при испытаниях на растяжение в целом характерны для магниевых сплавов при модификации их микроструктуры различными методами ИПД [14–17]. Изменения значений предельной деформации до разрушения магниевых сплавов при уменьшении среднего размера зерна могут быть обусловлены активацией новых дополнительных систем скольжения в зернах с микронными размерами, подобный эффект наблюдался в различных магниевых сплавах при измельчении зеренной структуры [18–21]. Измельчение зеренной структуры в магниевых сплавах также существенно уменьшает анизотропию их механических свойств.

Для дальнейшего анализа деформационного поведения обратимся к рис. 3, *b*, как видно из представленных графиков, при модификации зеренной структуры изменяется также и коэффициент деформационного упрочнения (КДУ). На протяжении почти всей третьей стадии (стадии параболического упрочнения) значение КДУ образца из обработанного материала выше, чем у образца из материала в состоянии поставки. Также стоит отметить уменьшение переходной зоны при переходе на четвертую стадию, что обусловлено более быстрым переходом от базисного скольжения к призматическому за счет уменьшения размера зерна. Уровень деформационного упрочнения и механизм переориентации внутри зерна, а также механизмы его измельчения при умеренных температурах деформации объясняются формированием в образце дислокационной субструктуры, в частности они определяют упрочнение при больших пластических деформациях (стадии III и IV кривых деформации), соответствующих обработке ЦПР [22–24].

Микротвердость образцов в исходном состоянии и после рифления прессованием была измерена на полуавтоматическом микротвердомере Duramin 5 производства Struers при нагрузке 2.0 Н и времени выдержки под нагрузкой 12 с. Значение микротвердости сплава Mg–Mn–Ce после обработки методом ЦПР имеет тенденцию к увеличению. В состоянии поставки микротвердость сплава Mg–Mn–Ce составляла 0.48 ГПа, а после трех циклов ЦРП на 12.5 % выше (0.54 ГПа).

Заключение

Интенсивная пластическая деформация материала до степени 3.5 приводит к измельчению зерна и формированию в материале структуры с распределением размеров зерен в диапазоне от 0.5 до 5 мкм. Проведенное исследование влияния модификации зеренной структуры листового проката магниевых сплавов Mg–Mn–Ce, на особенности механического поведения при растяжении и микротвердость показало, что структурные изменения, достигнутые после трех циклов ЦРП приводят к улучшению механических свойств материала, предел упругости и временное сопротивление разрушению возрастают на 30 и 17 % соответственно, при испытаниях на осевое растяжение в квазистатических условиях со скоростью деформации 10 с^{-1} . За счет уменьшения среднего размера зерна также улучшается склонность материала к активации дополнительных систем скольжения, что, в свою очередь, способствует достижению больших степеней деформации по сравнению с крупнокристаллическим материалом. Полученные данные о механическом поведении сплава Mg–1.3Mn–0.2Ce после обработки ЦПР согласуются с экспериментальными данными о механическом поведении мелкозернистых ГПУ сплавов, полученных другими методами ИПД.

ЛИТЕРАТУРА

1. Хрусталёв А.П., Ворожцов С.А., Жуков И.А., Промахов В.В., Даммер В.Х., Ворожцов А.Б. Структура и механические свойства композиционных материалов на основе магния, упрочненных наночастицами нитрида алюминия // Изв. вузов. Физика. 2016. Т. 59. № 12. С. 176–178.
2. Vorozhtsov S., Khrustalyov A., Khmeleva M., & Zhukov I. Structure and deformation characteristics in magnesium alloy ZK51A reinforced with AlN nanoparticles // AIP Conf. Proc. 2016. V. 1772. P. 030004. DOI:10.1063/1.4964542.
3. Valiev R.Z. and Langdon T.G. Principles of equal-channel angular pressing as a processing tool for grain refinement // Progress in Materials Science. 2006. V. 51(7). P. 881–981. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2006.02.003.
4. Furukawa M., Horita Z., Nemoto M. & Langdon, T.G. The use of severe plastic deformation for microstructural control // Materials Science and Engineering A. 2002. V. 324(1–2). P. 82–89. DOI: 10.1016/S0921-5093(01)01288-6.
5. Valiev R.Z., Alexandrov I.V., Zhu Y.T. & Lowe T.C. Paradox of strength and ductility in metals processed by severe plastic deformation // J. Materials Research. 2002. V. 17(1). P. 5–8. DOI: 10.1557/JMR.2002.0002.
6. Krasnoveikin V.A., Kozulin A.A. & Skripnyak V.A. Detection of structural changes and mechanical properties of light alloys after severe plastic deformation // J. Physics: Conference Series. 2017. V. 919. P. 012012. DOI: 10.1088/1742-6596/919/1/012012.
7. Jandaghi M.R. & Pouraliakbar H. Study on the effect of post-annealing on the microstructural evolutions and mechanical properties of rolled CGPed Aluminum-Manganese-Silicon alloy // Materials Science and Engineering A. 2017. V. 679. P. 493–503. DOI: 10.1016/j.msea.2016.10.054.
8. Fong K.S., Danno A., Tan M.J. & Chua B.W. Tensile flow behavior of AZ31 magnesium alloy processed by severe plastic deformation and post-annealing at moderately high temperatures // J. Materials Processing Technology. 2017. V. 246. P. 235–244. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2017.03.025.
9. Gupta A.K., Maddukuri T.S. & Singh S.K. Constrained groove pressing for sheet metal processing // Progress in Materials Science. 2016. V. 84. P. 403–462. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2016.09.008.
10. Moskvichev E.N., Skripnyak V.A., Skripnyak V.V., Kozulin A.A. & Lychagin D.V. Influence of structure to plastic deformation resistance of aluminium alloy 1560 after groove pressing treatment // Letters on Materials. 2016. V. 6(2). P. 141–145. DOI: 10.22226/2410-3535-2016-2-141-145.
11. Moskvichev E., Kozulin A., Krasnoveikin V. & Skripnyak V. Numerical simulation of deformation behavior of aluminum alloy sheets under processing by groove pressing method // MATEC Web of Conferences. V. 143. P. 01011. DOI: 10.1051/mateconf/201814301011.
12. Wang Q., Song J., Jiang B., Tang A., Chai Y., Yang T., Huang G. & Pan F. An investigation on microstructure, texture and formability of AZ31 sheet processed by asymmetric porthole die extrusion // Materials Science and Engineering A. 2018. V. 720. P. 85–97. DOI: 10.1016/j.msea.2018.02.055.
13. Han T., Huang G., Deng Q., Wang G., Jiang B., Tang A., Zhu Y. & Pan F. Grain refining and mechanical properties of AZ31 alloy processed by accumulated extrusion bonding // J. Alloys and Compounds. 2018. V. 745. P. 599–608. DOI: 10.1016/j.jallcom.2018.02.248.
14. Козулин А.А., Скрипняк В.А., Красновейкин В.А., Скрипняк В.В., Каравацкий А.К. Исследование физико-механических свойств ультрамелкозернистых магниевых сплавов после интенсивной пластической деформации // Изв. вузов. Физика. 2014. Т. 57. № 9. С. 98–104.
15. Yang Q., Jiang B., Jiang W., Luo S. & Pan F. Evolution of microstructure and mechanical properties of Mg–Mn–Ce alloys under hot extrusion // Materials Science and Engineering A. 2015. V. 628. P. 143–148. DOI: 10.1016/j.msea.2015.01.048.

16. Huo Q., Xiao Z., Yang X., Ando D., Sutou Y. & Koike J. Enhanced fatigue properties of cast AZ80 Mg alloy processed by cyclic torsion and low-temperature annealing // *Materials Science and Engineering A*. 2017. V. 696. P. 52–59. DOI: 10.1016/j.msea.2017.04.061.
17. Yang Q., Jiang B., Li X., Dong H., Liu W. & Pan F. Microstructure and mechanical behavior of the Mg–Mn–Ce magnesium alloy sheets // *J. Magnesium and Alloys*. 2014. V. 2(1). P. 8–12. DOI: 10.1016/j.jma.2014.01.009.
18. Cáceres C.H. & Blake A.H. On the strain hardening behaviour of magnesium at room temperature // *Materials Science and Engineering A*. 2007. V. 462(1–2). P. 193–196. DOI: 10.1016/j.msea.2005.12.113.
19. Chen L., Yuan F., Jiang P., Xie J. & Wu X. Mechanical properties and deformation mechanism of Mg–Al–Zn alloy with gradient microstructure in grain size and orientation // *Materials Science and Engineering A*. 2017. V. 694. P. 98–109. DOI: 10.1016/j.msea.2017.04.005.
20. Koike J., Kobayashi T., Mukai T., Watanabe H., Suzuki M., Maruyama K. & Higashi K. The activity of non-basal slip systems and dynamic recovery at room temperature in fine-grained AZ31B magnesium alloys // *Acta Materialia*. 2003. V. 51(7). P. 2055–2065. DOI: 10.1016/S1359-6454(03)00005-3.
21. Ang H.Q., Abbott T.B., Zhu S. & Easton M.A. Anelasticity of die-cast magnesium-aluminium based alloys under different strain rates // *Materials Science and Engineering A*. 2017. V. 707. P. 101–109. DOI: 10.1016/j.msea.2017.09.012.
22. Koneva N.A., Lychagin D.V., Trishkina L.I., Kozlov E.V. Types of dislocation sub-structures and stages of stress-strain curves of FCC alloys // *Strength of metals and alloys. Proc. of VII International conference*. V. 1. NY: Pergamon Press, 1985. P. 21–26. DOI: 10.1016/b978-0-08-031642-0.50011-8.
23. Kozlov E.V., Koneva N.A., Lychagin D.V., Trishkina L.I. Role of internal stress fields at various stages of strain hardening // *Physics of Metals and Metallography*. 2000. V. 90(1). P. S59–S67.
24. Koneva N.A., Lychagin D.V., Teplyakova L.A., Kozlov E.V., Parameters of dislocation structures and factors determining flow stress at stages III and IV // *Strength of metals and alloys. Proc. of VIII International conference*. V. 1. New York: Pergamon Press, 1988. P. 385–390. DOI: 10.1016/b978-0-08-034804-9.50057-7.

Статья поступила 28.09.18 г.

Moskvichev E.N., Skripnyak V.A., Karakulov V.V., Lychagin D.V. (2019) IMPACT OF THE MICROSTRUCTURE CHANGES UNDER CYCLIC GROOVE PRESSING ON THE MECHANICAL BEHAVIOR OF MG–MN–CE MAGNESIUM ALLOY. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 58. pp. 109–118

DOI 10.17223/19988621/58/9

In this study, the mechanical behavior of Mg–Mn–Ce magnesium alloy was investigated experimentally. The material tested had two structural states: coarse-crystalline (commercial rolled sheet) and microstructured state. The method of cyclic groove pressing (CGP), which allows processing of flat samples, is used to grind the material grain structure. The paper presents a description of the CGP and the results of investigation of the material microstructure at as-received state and after three processing cycles. The tensile tests were carried out under quasi-static conditions. Analysis of the grained structure performed using the electron and optical microscopy methods showed that the material treatment up to the deformation degree of 3.5 by CGP method made it possible to obtain the blanks with a fined structure whose grain size distribution was in the range of 0.5–5 μm with average grain size of 2.2 μm . The uniaxial tensile tests were carried out at a strain rate of 10s^{-1} at room temperature in order to assess the influence of structural modifications on the mechanical behavior. It was shown that the mechanical characteristics of material improved, and the yield stress and tensile strength increased by 30% and 17%, respectively. The grain structure changes were found to contribute to the activation of additional slip systems in the HCP lattice which enhanced the ultimate deformation to failure.

Financial support. The research was performed in the framework of the Program of Fundamental Research of the State Academies of Sciences for 2013–2020, line of research III.23, and partially supported by the Grant of the President of the Russian Federation (MK 2690.2017.8) and by the Russian Foundation for Basic Research (project No. 16-08-00037a).

Keywords: magnesium alloys, severe plastic deformation, cyclic groove pressing, microstructure, mechanical properties.

MOSKVICHEV Evgeny Nikolaevich (Institute of Strength Physics and Materials Science SB RAS, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: em_tsu@mail.ru

SKRIPNYAK Vladimir Al'bertovich (Doctor of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: skrp2006@yandex.ru

LYCHAGIN Dmitry Vasil'evich (Doctor of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: dvl-tomsk@mail.ru

KARAKULOV Valeriy Vladimirovich (Candidate of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation).

REFERENCES

1. Khrustalyov A.P., Vorozhtsov S.A., Zhukov I.A., Promakhov V.V., Dammer V.K., Vorozhtsov A.B. (2017) Structure and Mechanical Properties of Magnesium-Based Composites Reinforced with Nitride Aluminum Nanoparticles. *Russian Physics Journal*. 59(12). pp. 2183–2185. DOI: 10.1007/s11182-017-1034-6.
2. Vorozhtsov S., Khrustalyov A., Khmeleva M., Zhukov I. (2016) Structure and deformation characteristics in magnesium alloy ZK51A reinforced with AlN nanoparticles. *AIP Conference Proceedings*. 1772. 030004-1–030004-6. DOI:10.1063/1.4964542.
3. Valiev R.Z., Langdon T.G. (2006) Principles of equal-channel angular pressing as a processing tool for grain refinement. *Progress in Materials Science*. 51(7). pp. 881–981. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2006.02.003.
4. Furukawa M., Horita Z., Nemoto M., Langdon T.G. (2002) The use of severe plastic deformation for microstructural control. *Materials Science and Engineering A*. 324(1-2). pp. 82–89. DOI: 10.1016/S0921-5093(01)01288-6.
5. Valiev R.Z., Alexandrov I.V., Zhu Y.T., Lowe T.C. (2002) Paradox of strength and ductility in metals processed by severe plastic deformation. *Journal of Materials Research*. 17(1). pp. 5–8. DOI: 10.1557/JMR.2002.0002.
6. Krasnoveikin V.A., Kozulin A.A., Skripnyak V.A. (2017) Detection of structural changes and mechanical properties of light alloys after severe plastic deformation. *Journal of Physics: Conference Series*. 919. pp. 012012. DOI: 10.1088/1742-6596/919/1/012012.
7. Jandaghi M.R., Pouraliakbar H. (2017) Study on the effect of post-annealing on the microstructural evolutions and mechanical properties of rolled CGPed Aluminum-Manganese-Silicon alloy. *Materials Science and Engineering A*. 679. pp. 493–503. DOI: 10.1016/j.msea.2016.10.054.
8. Fong K.S., Danno A., Tan M.J., Chua B.W. (2017) Tensile flow behavior of AZ31 magnesium alloy processed by severe plastic deformation and post-annealing at moderately high temperatures. *Journal of Materials Processing Technology*. 246. pp. 235–244. DOI: 10.1016/j.jmatprotec.2017.03.025.
9. Gupta A.K., Maddukuri T.S., Singh S.K. (2016) Constrained groove pressing for sheet metal processing. *Progress in Materials Science*. 84. pp. 403–462. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2016.09.008.
10. Moskvichev E.N., Skripnyak V.A., Skripnyak V.V., Kozulin A.A., Lychagin D.V. (2016) Influence of structure to plastic deformation resistance of aluminium alloy 1560 after groove pressing treatment. *Letters on Materials*. 6(2). pp. 141–145. DOI: 10.22226/2410-3535-2016-2-141-145.

11. Moskvichev E., Kozulin A., Krasnoveikin V., Skripnyak V. (2018) Numerical simulation of deformation behavior of aluminum alloy sheets under processing by groove pressing method. *MATEC Web of Conferences*. 143. 01011. DOI: 10.1051/mateconf/201814301011.
12. Wang Q., Song J., Jiang B., Tang A., Chai Y., Yang T., Huang G., Pan F. (2018) An investigation on microstructure, texture and formability of AZ31 sheet processed by asymmetric porthole die extrusion. *Materials Science and Engineering A*. 720. pp. 85–97. DOI: 10.1016/j.msea.2018.02.055.
13. Han T., Huang G., Deng Q., Wang G., Jiang B., Tang A., Zhu Y., Pan F. (2018) Grain refining and mechanical properties of AZ31 alloy processed by accumulated extrusion bonding. *Journal of Alloys and Compounds*. 745. pp. 599–608. DOI: 10.1016/j.jallcom.2018.02.248.
14. Kozulyn A.A., Skripnyak V.A., Krasnoveikin V.A., Skripnyak V.V., Karavatskii A.K. (2015) An investigation of physico-mechanical properties of ultrafine-grained magnesium alloys subjected to severe plastic deformation. *Russian Physics Journal*. 57(9). pp. 1261–1267. DOI: 10.1007/s11182-015-0372-5.
15. Yang Q., Jiang B., Jiang W., Luo S., Pan F. (2015) Evolution of microstructure and mechanical properties of Mg–Mn–Ce alloys under hot extrusion. *Materials Science and Engineering A*. 628. pp. 143–148. DOI: 10.1016/j.msea.2015.01.048.
16. Huo Q., Xiao Z., Yang X., Ando D., Sutou Y., Koike J. (2017) Enhanced fatigue properties of cast AZ80 Mg alloy processed by cyclic torsion and low-temperature annealing. *Materials Science and Engineering A*. 696. pp. 52–59. DOI: 10.1016/j.msea.2017.04.061.
17. Yang Q., Jiang B., Li X., Dong H., Liu W., Pan F. (2014) Microstructure and mechanical behavior of the Mg–Mn–Ce magnesium alloy sheets. *Journal of Magnesium and Alloys*. 2(1). pp. 8–12. DOI: 10.1016/j.jma.2014.01.009.
18. Cáceres C.H., Blake A.H. (2007) On the strain hardening behaviour of magnesium at room temperature. *Materials Science and Engineering A*. 462(1-2). pp. 193–196. DOI: 10.1016/j.msea.2005.12.113.
19. Chen L., Yuan F., Jiang P., Xie J., Wu X. (2017) Mechanical properties and deformation mechanism of Mg–Al–Zn alloy with gradient microstructure in grain size and orientation. *Materials Science and Engineering A*. 694. pp. 98–109. DOI: 10.1016/j.msea.2017.04.005.
20. Koike J., Kobayashi T., Mukai T., Watanabe H., Suzuki M., Maruyama K., Higashi K. (2003) The activity of non-basal slip systems and dynamic recovery at room temperature in fine-grained AZ31B magnesium alloys. *Acta Materialia*. 51(7). pp. 2055–2065. DOI: 10.1016/S1359-6454(03)00005-3.
21. Ang H.Q., Abbott T.B., Zhu S., Easton M.A. (2017) Anelasticity of die-cast magnesium–aluminium based alloys under different strain rates. *Materials Science and Engineering A*. 707. pp. 101–109. DOI: 10.1016/j.msea.2017.09.012.
22. Koneva N.A., Lychagin D.V., Trishkina L.T., Kozlov E.V. (1985) Types of dislocation substructures and stages of stress-strain curves of F.C.C. alloys. *Strength of Metals and Alloys. Proceedings of the 7th International Conference*. 1. pp. 21–26. DOI: 10.1016/b978-0-08-031642-0.50011-8.
23. Kozlov E.V., Koneva N.A., Lychagin D.V., Trishkina L.T. (2000) Role of internal stress fields at various stages of strain hardening. *Physics of Metals and Metallography*. 90(1). pp. S59–S67.
24. Koneva N.A., Lychagin D.V., Teplyakova L.A., Kozlov E.V. (1988) Parameters of dislocation structures and factors determining flow stress at stages III and IV. *Strength of Metals and Alloys. Proceedings of the 8th International Conference*. pp. 385–390. DOI: 10.1016/b978-0-08-034804-9.50057-7.

Received: September 28, 2018

УДК 536.46+536.24

DOI 10.17223/19988621/58/10

В.А. Порязов, Д.А. Крайнов

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭРОЗИОННОГО ГОРЕНИЯ
МЕТАЛЛИЗИРОВАННЫХ ТВЕРДЫХ ТОПЛИВ¹**

Представлены математическая модель и методика расчета нестационарной скорости горения смесового металлизированного твердого топлива в условиях обдува. В постановке рассматривается горение плоской поверхности металлизированного топлива в неограниченном обдувающем потоке. Модель эрозийного горения металлизированных твердых топлив строится в пограничном приближении, в рамках которого факт обдува учитывается через турбулентный тепломассоперенос. Проведен расчетно-теоретический анализ влияния добавок порошка металла на скорость горения металлизированных твердых топлив в условиях обдува. Проведено исследование зависимости скорости горения от скорости обдувающего потока.

Ключевые слова: *металлизированное твердое топливо, математическая модель, скорость горения, обдув, эрозийный эффект, частицы алюминия.*

Известно, что при тангенциальном обдуве поверхности горения твердого топлива при некотором соотношении параметров потока и характеристик топлива изменяется линейная скорость горения. Изменение происходит как в большую, так и в меньшую сторону в зависимости от скорости обдувающего потока.

В 1942 г. при изучении горения пороха Н в условиях обдува О.И. Лейпунским был обнаружен эффект увеличения скорости горения. В работах Я.Б. Зельдовича предложена физическая модель, объясняющая увеличение скорости горения увеличением теплового потока, подводимого к поверхности горения, за счет роста турбулентного слагаемого коэффициента теплопроводности [1]. Большое развитие теория эрозийного горения получила в работах В.Н. Вилюнова [2, 3]. Большое внимание уделено изучению эффекта отрицательной эрозии [4]. Общую теорию эрозийного горения твердых ракетных топлив разработали академик А.М. Липанов и профессор В.К. Булгаков [5]. В монографии изложены физико-математические модели и результаты численного моделирования эрозийного горения твердых ракетных топлив. Дано объяснение положительного и отрицательного эрозийного эффекта. Проведен анализ влияния взаимодействия химической реакции с турбулентностью. Проведено исследование горения в условиях обдува нитроглицеринового пороха и смесового твердого топлива на основе перхлората аммония без добавок порошков металлов. В работах [6, 7] представлены результаты исследований внутрикамерных процессов для твердотопливных ракетных двигателей. Учет эффекта эрозии для изучения внутрикамерных процессов для твердотопливных ракетных двигателей носит важнейшую роль. Все современные смеси твердых топлива в своем составе содержат добавки порошков металлов, которые добавляются для повышения теплоты сгорания топлива. Добавки порошков металлов в состав твердого топлива, влияют на характеристики зажигания и горения топлива [8].

¹ Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта Президента РФ МК-1763.2017.8.

Актуальным является вопрос о влиянии обдува на скорость горения металлизированного твердого топлива. Расчетно-теоретические исследования эрозионного эффекта при горении в условиях обдува металлизированного твердого топлива не проводились.

Постановка задачи

В представленной работе рассматривается горение плоской поверхности металлизированного топлива в неограниченном обдувающем потоке. Модель эрозионного горения строится в погранслоном приближении в предположении асимптотического режима течения, в рамках которого факт обдува учитывается через турбулентный тепломассоперенос, пульсации температуры и концентрации реагентов. На основе нестационарной модели горения металлизированного твердого топлива в сопряженной постановке [9] построена модель горения металлизированного твердого топлива в условиях обдува. На поверхности топлива учитывается газификация компонентов твердого топлива и записывается условие сохранения потоков массы и энергии компонентов. В твердой фазе, под поверхностью газификации записывается уравнение переноса тепла и разложения топлива. Над поверхностью топлива записываются уравнения течения двухфазной реагирующей среды, учитывающие межфазный обмен импульсом и энергией, конвективный и кондуктивный теплоперенос, зависимость коэффициентов переноса от температуры и интенсивности турбулентности. Для описания характеристик динамической турбулентности в пограничном слое использовалась модель турбулентности Ван Дриста, являющаяся обобщением результатов экспериментов и широко распространенной в инженерных расчетах, так как справедлива во всей внутренней части пограничного слоя [5].

Математическая модель горения металлизированного твердого топлива состоит из уравнений:

Для твердого топлива, при $-\infty < x < x_s$:

$$c_1 \rho_1 \left(\frac{\partial T_1}{\partial t} + u \frac{\partial T_1}{\partial x} \right) = \lambda_1 \frac{\partial^2 T_1}{\partial x^2} + Q_1 k_1 \rho_1 (1 - \eta) \exp \left(-\frac{E_1}{RT_1} \right); \quad (1)$$

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} + u \frac{\partial \eta}{\partial x} = k_1 (1 - \eta) \exp \left(-\frac{E_1}{RT_1} \right). \quad (2)$$

Для газовой фазы, при $x_s < x < \infty$:

$$c_2 \rho_2 \left(\frac{\partial T_2}{\partial t} + u_x \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left((\lambda_2 + \lambda_t) \frac{\partial T_2}{\partial x} \right) + Q_2 Y \rho_2 k_2 \exp \left(\frac{-E_2}{R_y T_2} \right) + 4\pi \alpha r_3^2 n (T_3 - T_2); \quad (3)$$

$$\left(\frac{\partial Y}{\partial t} + u_x \frac{\partial Y}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left((D_2 + D_t) \frac{\partial Y}{\partial x} \right) - Y k_2 \exp \left(\frac{-E_2}{R_y T_2} \right); \quad (4)$$

$$c_3 \rho_3 \left(\frac{\partial T_3}{\partial t} + w_3 \frac{\partial T_3}{\partial x} \right) = -4\pi \alpha r_3^2 n (T_3 - T_2) + G Q_{Al} \frac{2\mu_{Al}}{3\mu_O}; \quad (5)$$

$$\frac{\partial \rho_2}{\partial t} + \frac{\partial (\rho_2 u_x)}{\partial x} = -G; \quad (6)$$

$$\frac{\partial \rho_3}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_3 w_3)}{\partial x} = G; \quad (7)$$

$$\frac{\partial w_3}{\partial t} + w_3 \frac{\partial w_3}{\partial x} = -\tau_{fr}; \quad (8)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(nw_3)}{\partial x} = 0; \quad (9)$$

$$P = \rho_2 R T_2 = \text{const}; \quad (10)$$

$$\rho_c = 1/(\alpha_{Al}/\rho_{Al} + \alpha_{\Pi}/\rho_{\Pi}),$$

$$\frac{du_y}{dx} = \frac{1}{\text{Pr}_m \frac{\lambda_m}{c_2} + \mu_t} (\tau_s + \rho_k V_k u_y + \frac{\partial p}{\partial y} x); \quad (11)$$

$$\lambda_t = \frac{c_2 \mu_t}{\text{Pr}_t} \frac{\varphi}{1 - \delta}; \quad (12)$$

$$\varphi = 1 - \exp\left(\frac{-B \cdot 0.09 k \rho_2^2}{\mu_t \cdot W}\right), \quad \delta = 2 \frac{\mu_t \varphi}{\rho_2^2 k} \frac{Q_2}{c_2} \frac{dW}{dT_2}, \quad W = k_2 Y \rho_2 \exp\left(\frac{-E_2}{R_g T_2}\right),$$

$$c_k = 0.3, \quad x_* = 26, \quad B = 5,$$

$$l = Kx \left[1 - \exp\left(-\frac{x}{x_*} \sqrt{\tau_s \rho_k} \frac{1}{\mu_m}\right) \right], \quad v_t = l^2 \frac{du_y}{dx}, \quad \mu_t = \rho_2 v_t, \quad k = \frac{1}{c_k} \left(\frac{v_t}{l} \right)^2.$$

В системе уравнений (1) – (12): (1), (3), (5) – уравнения энергии для твердого топлива, газовой фазы и частиц алюминия; (2) – уравнение глубины превращения конденсированной фазы; (4) – уравнение выгорания окислителя в газовой фазе; (6) – уравнение сохранения массы газовой фазы; (7) – уравнение сохранения массы частиц; (8) – уравнение движения частиц; (9) – уравнение числа частиц; (10) – уравнение состояния идеального газа; (11) – уравнение движения тангенциальной составляющей обдувающего потока; (12) – выражение для турбулентного коэффициента теплопроводности, полученного из модели турбулентности Ван Дрифта.

Координата x_s соответствует поверхности горения. На границе x_s граничные условия выражают законы сохранения массы и энергии:

$$\lambda_1 \frac{\partial T_1(x_s, t)}{\partial x} = \lambda_2 \frac{\partial T_2(x_s, t)}{\partial x}, \quad T_1(x_s, t) = T_2(x_s, t),$$

$$\alpha_{Al} \rho_1 u = \rho_3 w_3(x_s, t), \quad (1 - \alpha_{Al}) \rho_1 u = \rho_2(x_s, t) u_x(x_s, t), \quad (13)$$

$$T_3(x_s, t) = T_1(x_s, t), \quad n(x_s, t) = \frac{\rho_3(x_s, t)}{4/3 \pi r_{Al,0}^3 \rho_k}, \quad \rho_2(x_s, t) = p \mu / R T_2(x_s, t),$$

$$(1 - \alpha_{Al}) \rho_1 u = (\rho_2 u_x Y)|_{(x_s, t)} - D \rho_2(x_s, t) \frac{\partial Y(x_s, t)}{\partial x},$$

$$\frac{\partial T_1(-\infty, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial T_2(\infty, t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial Y(\infty, t)}{\partial x} = 0.$$

Начальные условия:

Для $-\infty < x < x_s$:

$$T_1(x, 0) = T_0, \quad \eta(x, 0) = 0. \quad (14)$$

Для $x_s < x < \infty$:

$$\begin{aligned} T_2(x, 0) &= T_{ig}, \quad T_3(x, 0) = T_{ig}, \quad Y(x, 0) = 0, \\ u_x(x, 0) &= 0, \quad w_3(x, 0) = 0, \quad n(x, 0) = 0, \\ \rho_2(x, 0) &= p_n \mu / R T_{ig}, \quad \rho_3(x, 0) = 0. \end{aligned} \quad (15)$$

В уравнении (8) сила взаимодействия частиц алюминия с газом вычисляется по формуле

$$\begin{aligned} \tau_{fr} &= \frac{F_{fr}}{4/3 \pi r_3^3 \rho_{Al}}, \quad F_{fr} = C_R S_m \frac{\rho_2 (w_3 - u) |u - w_3|}{2}, \\ C_R &= \frac{24}{Re} (1 + 0.15 Re^{0.682}), \quad Re = \frac{2 \rho_2 r_3 |u - w_3|}{\mu_m}, \quad S_m = \pi r_3^2, \end{aligned} \quad (16)$$

где Re – число Рейнольдса; S_m – площадь миделева сечения; C_R – коэффициент трения; ρ_{Al} – плотность алюминия; η – коэффициент динамической вязкости.

Коэффициент теплоотдачи α определяется по формуле

$$\alpha = \frac{Nu(\lambda_2 + \lambda_t)}{2r_3}, \quad Nu = 2 + \sqrt{Nu_l^2 + Nu_t^2}, \quad (17)$$

$$Nu_l = 0.664 Re^{0.5}, \quad Nu_t = 0.037 Re^{0.8},$$

где Nu – число Нуссельта.

Скорость изменения массы частиц алюминия при их горении, а также уравнения, определяющие текущие значения размеров частиц и алюминия в частице имеют вид

$$G = \frac{3\mu_O}{2\mu_{Al}} n \rho_{Al} 4\pi a^{0.9} r_{Al}^{3/2} k_{Al}, \quad (18)$$

где k_{Al} – константа скорости горения частицы алюминия в среде окислителя; a – коэффициент избытка окислителя.

$$\begin{aligned} r_{Al} &= \left[\left(\frac{\mu_{Al} + 3/2 \mu_O}{\mu_{Al}} r_{Al,0}^3 - \frac{\rho_3}{(4/3) \pi n \rho_{Al}} \right) \frac{2\mu_{Al}}{3\mu_O} \right]^{1/3}, \\ r_3 &= \left[r_{Al}^3 + \frac{\mu_{Al} + 3/2 \mu_O}{\mu_{Al}} (r_{Al,0}^3 - r_{Al}^3) \right]^{1/3}, \end{aligned} \quad (19)$$

Система уравнений (1) – (10), с начальными и граничными условиями (13) – (15), выражениями для правых частей (16) – (19), дополненными выражением сохранения движения для тангенциальной составляющей обдувающего потока (11) и моделью турбулентности Ван Дрифта (12), описывает горение твердого ракетного топлива с добавлением частиц алюминия в погранслоном приближении.

В модели (1) – (19) приняты обозначения: c_2 , c_c , c_{Al} – удельные теплоемкости газа при постоянном давлении пороха Н и алюминия; D – коэффициент диффузии; E_2 – энергия активации химической реакции в газе; G – скорость изменения массы частиц при их горении; k_0 – предэкспоненциальный множитель в законе Аррениуса скорости химической реакции в газе; n – число частиц в единице объема; P – давление; Q_2 – тепловой эффект реакции в газовой фазе; Q_{Al} – эффективная теплота сгорания алюминия; R – газовая постоянная; R_y – универсальная газовая постоянная; r_{Al} – радиус алюминия; r_3 – радиус частицы; t – время; T – температура; u_x , u_y – нормальная и тангенциальная компоненты скорости газа; u – скорость горения; w_3 – скорость частиц; x – координата; Y – относительная концентрация окислителя в газовой фазе; α – коэффициент теплоотдачи; α_{Al} – массовая доля алюминия в составе СТТ; λ – коэффициент теплопроводности; ρ_k – плотность металлизированного твердого топлива; ρ_2 – плотность газа; ρ_3 – приведенная плотность частиц (масса частиц в единице объема); ρ_{Al} – плотность алюминия; τ_{fr} – сила трения; μ_{Al} , μ_O – молярные массы молекул алюминия и кислорода, μ_m , μ_t – коэффициенты динамической вязкости молекулярный и турбулентный.

Индексы: 2 – газовая фаза; t – турбулентный; i – номер фракции частиц; 3 – конденсированная фаза продуктов горения; Al – алюминий; c – относится к конденсированному веществу (твердому топливу); ign – воспламенение.

Методика решения

Система уравнений (1) – (10), с начальными и граничными условиями (13) – (15), выражениями для правых частей (16) – (19) решалась методами, описанными в [9]. После установления стационарного распределения параметров над поверхностью горения твердого топлива система решаемых уравнений дополняются уравнениями (11) – (12) [5]. Счет шага по времени повторяется необходимое число раз для нового установления стационарного распределения параметров газодисперсной среды над поверхностью горения при решении системы уравнений (1) – (19). При расчетах, в уравнении (11) принималось, что $\partial p / \partial y = 0$, и уравнение имеет аналитическое решение.

Расчеты проводились для значений теплофизических и формально-кинетических параметров, характерных для пороха Н:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= 0.25 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}, \lambda_2 = 0.066 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}, Q_1 = 556800 \text{ Дж/кг}, \\ Q_2 &= 2435300 \text{ Дж/кг}, Q_{Al} = 36.51 \cdot 10^6 \text{ Дж/кг}, E_1 = 80000 \text{ Дж/моль}, \\ E_2 &= 186107 \text{ Дж/моль}, k_1 = 2 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}, k_2 = 3.92 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1}, k_{Al} = 2.22 \cdot 10^{-5} \text{ м}^{1.5}/\text{с}, \\ a &= 0.5, c_1 = 1465 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}, c_2 = 1466 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}, c_3 = 760 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}, \\ \rho_1 &= 1600 \text{ кг/м}^3, \rho_k = 2600 \text{ кг/м}^3, \rho_{Al} = 2600 \text{ кг/м}^3, R = 8.31 \text{ Дж/(моль} \cdot \text{К)}, \\ T_0 &= 293 \text{ К}, T_{ig} = 1300 \text{ К}. \end{aligned}$$

Коэффициент диффузии вычисляется через число Льюиса Le : $D_2 = Le \lambda_2 / (c_2 \rho_2)$, число Льюиса принято $Le = 1$. Температура воспламенения частиц алюминия

принята равной 1300 К. Величина начального радиуса частицы в расчетах $r_{Al,0} = 3$ мкм, массовая доля порошка алюминия принята равной 9 % массы топлива. Формально-кинетические параметры взяты из [5].

Результаты расчетов

С использованием изложенной методики расчета проведены численные исследования влияния скорости обдувающего потока на величину скорости горения. Было проведено тестирование разработанной методики и программы ЭВМ решения системы уравнений (1) – (19). В процессе вычислений контролировалась выполнимость законов сохранения массы и полной энергии, которые выполнялись с точностью не менее 99 %.

Расчеты зависимости скорости горения пороха Н с добавлением порошка алюминия проводились при $r_{Al,0} = 3$ мкм, $\alpha_{Al} = 0.09$.

На рис. 1 представлена зависимость скорости горения пороха Н с добавлением 9% масс порошка алюминия начального радиуса $r_{Al,0} = 3$ мкм в зависимости от скорости обдувающего потока.

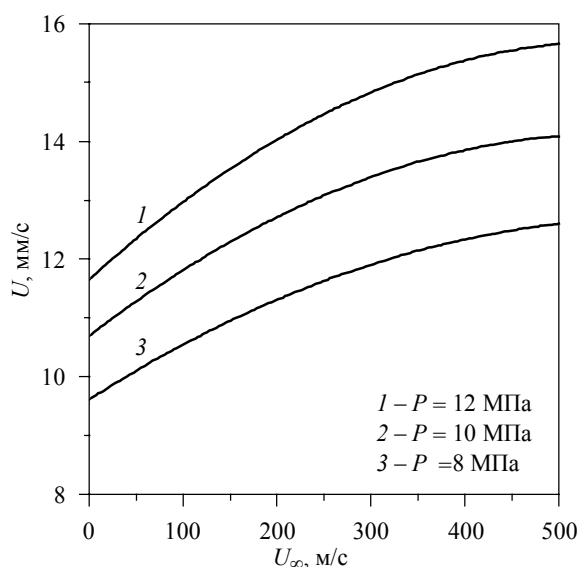


Рис. 1. Зависимость скорости горения пороха Н с добавлением порошка алюминия от скорости обдувающего потока при различных давлениях

Fig. 1. Combustion rate of the powder N with aluminum powder additive as a function of the blowing air velocity at various pressures

Видно, что с увеличением скорости обдувающего потока и давления над поверхностью СТТ скорость горения увеличивается. Характер зависимости скорости горения твердого топлива от скорости обдувающего потока не зависит от давления и соответствует характеру зависимости, описанному в научной литературе [2, 5].

На рис. 2 представлено распределение профиля температуры топлива и газа при горении без обдува и в условиях обдува. Начальный радиус частицы алюминия в расчетах $r_{Al,0} = 3$ мкм, массовая доля порошка алюминия 9 % массы топлива, давление над поверхностью горения $P = 10$ МПа. Видно, что профиль температуры газа существенно деформируется за счет увеличения турбулентного коэффициента теплопроводности и увеличивает тепловой поток к поверхности горения. Профиль тангенциальной составляющей скорости газа и турбулентного коэффициента теплопроводности над поверхностью горения представленного на рис. 3. Полученные зависимости соответствуют предсказанным в научной литературе [1, 2, 5].

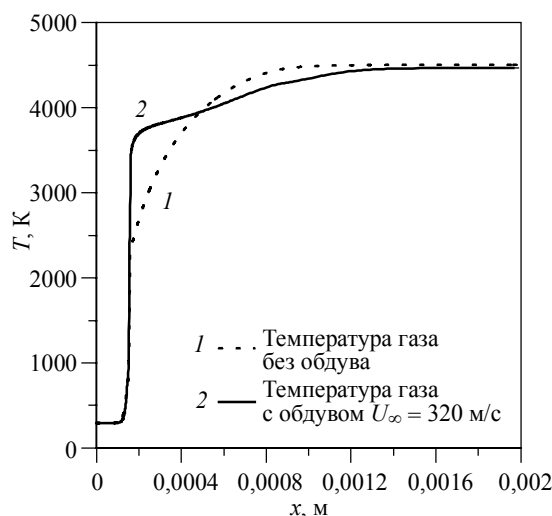


Рис. 2. Распределение температуры металлизированного твердого топлива и газа без обдува (кр. 1) и при обдуве (кр. 2) поверхности горения; $P = 10$ МПа, $U_{\infty} = 320$ м/с

Fig. 2. Distribution of the temperature of a metallized solid propellant and gas under conditions with (curve 1) and without (curve 2) blowing at $P = 10$ MPa and $U_{\infty} = 320$ m/s

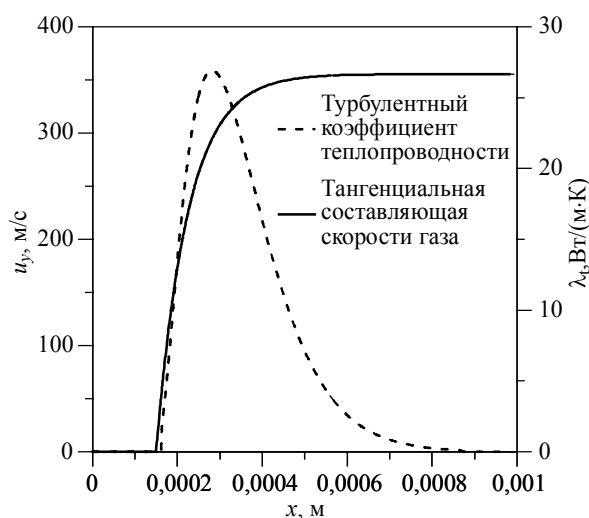


Рис. 3. Распределение тангенциальной составляющей скорости газа и турбулентного коэффициента теплопроводности над поверхностью горения; $P = 10$ МПа

Fig. 3. Distribution of the gas tangential velocity and turbulent coefficient of thermal conductivity over a burning surface at $P = 10$ MPa

Заключение

В работе представлены разработанная математическая модель, методика и результаты расчета нестационарной скорости горения смесового металлизированного твердого топлива в условиях обдува. Факт обдува учитывается через турбулентный тепло - массоперенос.

Проведен расчетно-теоретический анализ влияния добавок порошка алюминия на скорость горения металлизированных твердых топлив в условиях обдува. Проведено исследование зависимости скорости горения от скорости обдувающего потока.

В постановке рассматривается горение плоской поверхности металлизированного топлива в неограниченном обдувающем потоке. Данная модель не позволяет учесть особенности обдувающего потока на начальном участке или реальную геометрию канала РДТТ, но позволяет учесть физические особенности влияния добавок порошка алюминия в состав твердого ракетного топлива при горении в условиях обдува.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зельдович Я.Б. К теории горения пороха в газовом потоке // Физика горения и взрыва. 1971. Т. 7. № 4. С. 463–476.
2. Вилунов В.Н. К теории эрозионного горения порохов // ДАН СССР. 1961. Т. 136. № 2. С. 381–383.
3. Вилунов В.Н., Дворяшин А.А. О закономерности горения пороха Н в потоке газа // Физика горения и взрыва. 1971. Т. 7. № 1. С. 45–51.
4. Булгаков В.К., Липанов А.М., Вилунов В.Н., Карпов А.И. О механизме отрицательной эрозии при горении твердых топлив // Физика горения и взрыва. 1989. Т. 25. № 4. С. 32–35.
5. Булгаков В.К., Липанов А.М. Теория эрозионного горения твердых ракетных топлив. М.: Наука, 2001. 138 с.
6. Minkov L.L., Shrager E.R. and Kiryushkin A.E. Two Approaches for Simulating the Burning Surface in Gas Dynamics // Key Engineering Materials. 2016. V. 685. P. 114–118. DOI: 10.4028/www.scientific.net/KEM.685.114.
7. Глазунов А.А., Еремин И.В., Жильцов К.Н. и др. Численное исследование определения величин пульсаций давления и собственных акустических частот в камерах сгорания с наполнителем сложной формы // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2017. № 53. С. 59–72. DOI: 10.17223/19988621/53/6.
8. Архипов В.А., Бондарчук С.С., Коротких А.Г. и др. Влияние дисперсности алюминия на характеристики зажигания и нестационарного горения гетерогенных конденсированных систем // Физика горения и взрыва. 2012. Т. 48. № 5. С. 148–159.
9. Порязов В.А., Крайнов А.Ю. Математическая модель и расчет нестационарной скорости горения металлизированных твердых ракетных топлив // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2017. № 50. С. 99–111.

Статья поступила 21.10.18 г.

Poryazov V.A., Krainov D.A. (2019) MATHEMATICAL MODELING OF THE EROSION BURNING OF METALLIZED SOLID PROPELLANTS. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 58. pp. 119–127

DOI 10.17223/19988621/58/10

This paper proposes a mathematical model and a computational method for unsteady combustion rate of a composite metallized solid propellant under conditions of blowing. A flat surface of the metallized propellant burning in an unlimited blowing flow is considered. The

model of erosive burning for metallized solid propellants is developed using the boundary layer approximation on the assumption of asymptotic flow regime which accounts for a blowing process in terms of turbulent heat and mass transfer, temperature pulsations, and reagent concentrations. The paper provides a computational and theoretical analysis of the impact of metal powder additives on the combustion rate of metallized solid propellants under conditions of blowing. The combustion rate is presented as a function of the blowing stream velocity.

Financial support. This work was supported by the Grant of the President of the Russian Federation (MK-1763.2017.8).

Keywords: metallized solid propellant, mathematical model, combustion rate, blowing effect, erosive burning, aluminum particles.

PORYAZOV Vasily Andreevich (Candidate of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: poryazov@ftf.tsu.ru

KRAINOV Dmitry Alekseevich (Candidate of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: krainov@tpu.ru

REFERENCES

1. Zel'dovich Ya.B. (1971) Theory of propellant combustion in a gas flow. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 7(4). pp. 399–408. DOI: 10.1007/BF00740666.
2. Vilyunov V.N. (1961) K teorii erozionnogo gorenija porokhov [On the theory of erosive combustion of gunpowders]. *Dokl. Akad. Nauk*. 136(2). pp. 381–383.
3. Vilyunov V.N., Dvoryashin A.A., Margolin A.D., Ordzhonikidze S.K., Pokhil P.F. (1972) Burning of ballistite type H in sonic flow. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 8(4). pp. 410–413. DOI: 10.1007/BF00741194.
4. Bulgakov V.K., Lipanov A.M., Vilyunov V.N., Karpov A.I. (1989) The negative-erosion mechanism in solid-fuel combustion. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 25(4). pp. 410–412. DOI: 10.1007/BF00751543.
5. Bulgakov V.K., Lipanov A.M. (2001) *Teoriya erozionnogo gorenija tverdykh raketnykh topliv* [Theory of erosive combustion of solid rocket propellants]. Moscow: Nauka.
6. Minkov L.L., Shrager E.R., Kiryushkin A.E. (2016) Two approaches for simulating the burning surface in gas dynamics. *Key Engineering Materials*. 685. pp. 114–118. DOI: 10.4028/www.scientific.net/KEM.685.114.
7. Glazunov A.A., Eremin I.V., Zhil'tsov K.N., Kostyushin K.V., Tyryshkin I.M., Shuvarikov V.A. (2018) Chislennoe issledovanie opredeleniya velichin pul'satsiy davleniya i sobstvennykh akusticheskikh chastot v kamerakh sgoraniya s napolnitelem slozhnoy formy [Numerical investigation of the pressure pulsation magnitude and natural aeroacoustic frequencies in the combustion chambers with a charge of a complex shape]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 53. pp. 59–72. DOI: 10.17223/19988621/53/6.
8. Arkhipov V.A., Bondarchuk S.S., Korotkikh A.G., Kuznetsov V.T., Gromov A.A., Volkov S.A., Revyagin L.N. (2012) Influence of aluminum particle size on ignition and nonstationary combustion of heterogeneous condensed systems. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 48(5). pp. 625–635. DOI: 10.1134/S0010508212050140.
9. Poryazov V.A., Krainov A.Yu. (2017) *Matematicheskaya model' i raschet nestatsionarnoy skorosti gorenija metallizirovannykh tverdykh raketnykh topliv* [Mathematical model and calculation of the unsteady combustion rate of the metallized solid rocket propellants]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 50. pp. 99–111. DOI: 10.17223/19988621/50/9.

УДК 539.3; 539.5

DOI 10.17223/19988621/58/11

А.С. Скалиух

ФУНКЦИОНАЛЬНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ФИЗИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ОТ НЕОБРАТИМЫХ ПАРАМЕТРОВ ПРИ ЭЛЕКТРОМЕХАНИЧЕСКОМ ВОЗДЕЙСТВИИ НА СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ КЕРАМИКИ¹

Для необратимых процессов деформирования и поляризации устанавливается линейная функциональная зависимость упругих, пьезоэлектрических и диэлектрических характеристик деформированного и частично поляризованного поликристаллического сегнетоэлектрического тела от необратимых параметров, к которым относятся остаточная деформация и поляризация, когда направление вектора электрического поля не совпадает ни с одной из главных осей тензора напряжения.

Ключевые слова: определяющие соотношения, деформирование, поляризация, сегнетоэлектрики, сегнетоэластики, индуцированные и остаточные параметры, необратимый процесс.

Обозначения и операции тензорной алгебры и анализа

В данной статье приняты следующие обозначения и операции тензорной алгебры и анализа: T_n – линейное пространство тензоров n -го ранга; $\{\mathbf{e}_m\}_{m=1}^3, \{\mathbf{e}^m\}_{m=1}^3$ – векторы основного и взаимного базисов; $g_{mn} = \mathbf{e}_m \cdot \mathbf{e}_n$ – метрические коэффициенты; $\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\varepsilon} \in T_2$ – тензоры напряжений и деформации; $\mathbf{E}, \mathbf{D} \in T_1$ – векторы электрического поля и электрической индукции; $\boldsymbol{\varepsilon}_0 \in T_2$ – тензор остаточной деформации; $\mathbf{P}_0 \in T_1$ – вектор остаточной поляризации; $\mathbf{S} \in T_4, \mathbf{d} \in T_3, \boldsymbol{\alpha} \in T_2$ – тензор упругих податливостей, тензор пьезоэлектрических модулей и тензор диэлектрических проницаемостей соответственно. Простое умножение $\mathbf{d} \cdot \mathbf{E} = d^{mnk} E^s g_{ks} \mathbf{e}_m \mathbf{e}_n$; полное умножение тензоров одного ранга $\boldsymbol{\sigma} : \boldsymbol{\varepsilon} = \sigma^{mn} \varepsilon^{ks} g_{mk} g_{ns} = \sigma^{mn} \varepsilon_{mn}$, полное умножение тензоров разных рангов $\mathbf{S} : \boldsymbol{\sigma} = S^{mnks} \sigma^{ij} g_{ki} g_{sj} \mathbf{e}_m \mathbf{e}_n = S^{mnks} \sigma_{ks} \mathbf{e}_m \mathbf{e}_n$; если ранг тензора первого множителя меньше ранга второго множителя, то $\boldsymbol{\sigma} : \mathbf{S} = \sigma^{ij} S^{mnks} g_{jn} g_{im} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_s = S^{mnks} \sigma_{mn} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_s$. Операция транспонирования $\mathbf{S}^{T((12),(34))} = S^{mnks} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_s \mathbf{e}_n \mathbf{e}_m$. Набла – оператор Гамильтона $\nabla = \mathbf{e}^m \frac{\partial}{\partial x^m}$. Производная тензорной функции по тензорному аргументу

$$S_{,\varepsilon} \equiv \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \frac{\partial S^{mnks}}{\partial \varepsilon^{ij}} \mathbf{e}_m \mathbf{e}_n \mathbf{e}_k \mathbf{e}_s \mathbf{e}^i \mathbf{e}^j \text{ и т.д.}$$

¹ Работа поддержана РФФИ, грант 17-08-00860-а.

Введение

Стремительное внедрение сегнетоэлектрических материалов в технику за последние два десятилетия обусловлено их замечательными пьезоэлектрическими и диэлектрическими свойствами. Большую роль в этом играют поликристаллические материалы, или керамики, технология изготовления которых позволяет получать рабочие элементы сенсоров и актуаторов различных форм и размеров. Для придания рабочих свойств керамику подвергают предварительной поляризации в сильном электрическом поле. В результате этого изменяется структура материала, изменяется класс анизотропии и появляются пьезоэлектрические свойства. Кроме электрического поля на процесс поляризации влияют также интенсивные механические напряжения. В отличие от пластических материалов здесь при интенсивных нагрузках появляется не только остаточная деформация, но и остаточная поляризация. В дальнейшем поляризованная керамика используется в малых электрических и механических полях, когда ее структура уже не изменяется. Однако сами процессы поляризации электрическим полем и деполяризации механическими напряжениями являются необратимыми процессами и играют важную роль в первоначальном формировании структуры материала. Математическое моделирование необратимых процессов деформирования и поляризации (квазистатистический процесс) осуществляется на основе общих законов механики сплошных сред [1]. Полная система уравнений включает в себя полевые уравнения (уравнения равновесия и статики диэлектриков), геометрические соотношения (связь тензора деформаций с вектором перемещения и электрического поля с электрическим потенциалом) и определяющие соотношения (дифференциальные или интегральные операторы гистерезисного типа). Вывод определяющих соотношений связан с учетом многих факторов и должен опираться на физику явления, учитывать внутреннюю структуру материала и достаточно точно согласовываться с экспериментальными данными. К настоящему времени накоплен определенный опыт моделирования и можно выделить несколько основных направлений исследования, принципиально отличающиеся друг от друга. Это феноменологические методы [2–8], типа методов пластичности, методы двухуровневой сплошной среды [9–14], опирающиеся на методы микромеханических переключений и некоторые другие [15]. Эксперименты показывают, что в процессе поляризации меняется класс анизотропии материала, появляются пьезоэлектрические свойства, соответственно упругие, диэлектрические и пьезоэлектрические свойства также меняются. В отмеченных работах для упрощения делаются предположения о том, что упругие и диэлектрические свойства изменяются столь незначительно, что их можно взять такими, какие они в неполяризованном состоянии. Основной акцент делается на пьезоэлектрические модули, причем учитывается только влияние остаточной поляризации посредством введения множителя, в виде отношения модуля вектора остаточной поляризации на величину поляризации насыщения. Делается это безо всякого доказательства, исключительно с помощью интуитивных соображений. Однако при таком подходе остается открытым вопрос о механическом деформировании поликристаллического сегнетоэлектрика интенсивными механическими напряжениями, когда появляется остаточная деформация, меняется класс анизотропии материала, а описать эту анизотропию невозможно. Исследований, посвященным изучению влияния остаточной деформации на упругие модули в этом случае, автором не обнаружено. В [16] рассмотрена модель Джила – Атертона, являющаяся разновидностью микромеханических моделей. В ней авторы для

учета обратимых параметров вводят один скалярный коэффициент, да и тот приходится подбирать при сравнении с экспериментальными результатами. В [17] авторы предложили конечно-элементный подход, в рамках которого проводят усреднение и получают эффективные модули поляризованной керамики. Но и здесь функциональная зависимость от остаточных параметров не раскрыта.

В настоящей работе с помощью термодинамического подхода установлена функциональная зависимость для тензоров упругих, пьезоэлектрических и диэлектрических модулей от вектора остаточной поляризации и тензора остаточной деформации, когда протекает необратимый процесс поляризации и деформирования в поликристаллическом сегнетоэлектрике при нагрузках, не приводящих к разрушению. Предметом исследования являются поликристаллические сегнетоэлектрические материалы. Из общей модели, описывающей меняющиеся упругие и необратимые параметры, целенаправленно выбраны определяющие соотношения для обратимых частей поляризации и деформирования. В отличие от многих задач пластических материалов, где упругие деформации подчиняются закону Гука с модулем упругости и коэффициентом Пуассона изотропного тела, здесь тело претерпевает фазовый переход «твердое тело – твердое тело», переходя из изотропного состояния в анизотропное, при котором физические модули изменяются в процессе развития пластической деформаций и остаточной поляризации.

1. Определяющие соотношения для обратимых параметров

Для определения параметров рассматриваемых процессов обратимся к основным положениям внутреннего строения поликристаллических сегнетоэлектриков [1]. Сегнетоэлектрическая керамика состоит из огромного числа кристаллитов, размерами порядка $10^{-6} - 10^{-5}$ м. На линейном размере кристаллита оказывается в среднем от одного до сотни доменов, каждый из которых способен содержать сотни и более атомных ячеек. Поэтому как в мелкозернистых, так и в крупнозернистых керамиках количество атомных ячеек по линейному размеру кристаллита составляет число порядка 10^4 . В каждой атомной ячейке в низкотемпературной сегнетоэлектрической фазе центр положительных и отрицательных зарядов не совпадают, что характеризуется объемной плотностью электрических диполей в виде вектора спонтанной поляризации $\mathbf{p}_s$ и тензора спонтанной деформации $\mathbf{\epsilon}_s$, одна из главных осей которого совпадает с направлением вектора $\mathbf{p}_s$. Пусть для определенности рассматриваются сегнетоэлектрики типа перовскита, типичным представителем которых является титанат бария. Под представительным объемом понимаем объем, линейные размеры которого значительно меньше линейных размеров конечного тела, но содержащий огромное количество кристаллитов, для сохранения физических свойств тела. Для наглядности на рис. 1 показан представительный объем, в котором каждый кристаллит просто совпадает с одним доменом. В деполяризованном состоянии векторы спонтанной поляризации, показанные стрелками, располагаются произвольным образом. Взяв некоторую точку за точку приведения, можно поставить в соответствие каждому вектору спонтанной поляризации коллинеарный ему единичный вектор. Деполяризованное состояние характеризуется равномерным распределением таких векторов на единичной сфере, как показано на том же рисунке.

Если приложить интенсивное электрическое поле, то векторы спонтанной поляризации поворачиваются наиболее близко к направлению поля, подчиняясь кристаллографическому строению сегнетоэлектрика, что и показано на рис. 2.

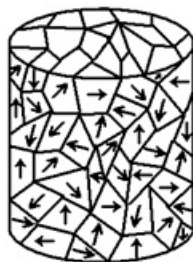


Рис. 1. Представительный объем в деполаризованном состоянии и распределение осей доменов

Fig. 1. Representative volume in a depolarized state and distribution of the domain axes

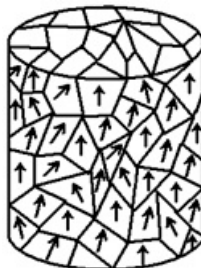
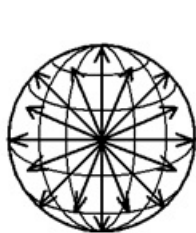


Рис. 2. Представительный объем в поляризованном электрическим полем состоянии и распределение осей доменов

Fig. 2. Representative volume in a polarized state provided by electric field and distribution of the domain axes



Изображающие единичные векторы расположатся в конусе, показанном на рис. 3, *a*. После снятия электрического поля векторы спонтанной поляризации остаются в таком положении и в начальное состояние не возвращаются, что характеризует изменившуюся структуру. Однако и механические напряжения могут поворачивать векторы спонтанной поляризации, при достижении ими пороговых значений. В частности, для сжимающих напряжений оси доменов располагаются в торе треугольного сечения, а для растягивающих – в двух одноосных конусах с общей вершиной, как показано на рис. 3, *b* и *c*.

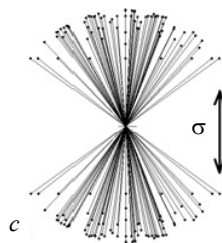
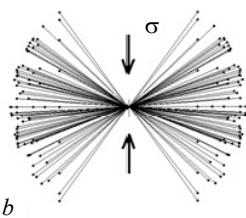
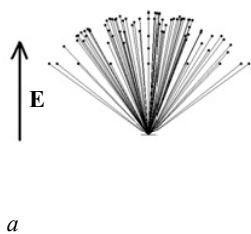


Рис. 3. Распределение осей векторов спонтанной поляризации после воздействия: *a* – электрического поля; *b* – сжимающих напряжений; *c* – растягивающих напряжений

Fig. 3. Distribution of the axes of spontaneous polarization vectors after the action of: (a) electric field, (b) compressive stresses, and (c) tensile stresses

В этом проявляются отличительные особенности сегнетоэлектриков от ферромагнетиков, у которых векторы спонтанной намагниченности могут поворачиваться в направлении магнитного поля на любой угол.

В представительном объеме, содержащем N элементарных ячеек, определяется вектор остаточной поляризации и тензор остаточной деформации путем операции осреднения:

$$\mathbf{P}_0 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (\mathbf{p}_s)_k, \quad \boldsymbol{\varepsilon}_0 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (\boldsymbol{\varepsilon}_s)_k.$$

Пусть к представительному объему поликристаллической сегнетоэлектрической среды приложено внешнее электрическое поле $\mathbf{E}$ и механическое напряже-

ние σ . Считается, что эти поля неизменны во всех точках представительного объема, что позволяет считать их определяющими параметрами. Под их воздействием доменные стенки деформируются. Эти явления описываются результирующими эффектами в виде обратимых составляющих вектора поляризации и тензора деформации $\mathbf{P}_e, \boldsymbol{\varepsilon}_e$, которые исчезают при исчезновении нагрузок. Как только механические или электрические воздействия достигают пороговых значений, начинаются повороты векторов спонтанной поляризации, и связанные с ними изменениями направлений главных осей тензоров спонтанной деформации. Доменные стенки передвигаются, что приводит к появлению вышеопределенных необратимых параметров $\mathbf{P}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0$. В связи с вышесказанным вектор поляризации $\mathbf{P}$ и тензор деформации $\boldsymbol{\varepsilon}$ в необратимых процессах подразделяют на обратимые $\mathbf{P}_e, \boldsymbol{\varepsilon}_e$ и необратимые $\mathbf{P}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0$ части: $\mathbf{P} = \mathbf{P}_e + \mathbf{P}_0, \boldsymbol{\varepsilon} = \boldsymbol{\varepsilon}_e + \boldsymbol{\varepsilon}_0$, и относят к искомым параметрам. Обратимые части являются параметрами состояния и связаны с внутренней энергией, а необратимые части являются параметрами процесса, и для их определения приходится использовать дополнительные соотношения, наступающие в процессе достижения нагрузками пороговых значений.

Целью нашего исследования является построение определяющих соотношений обратимых составляющих и установление функциональной зависимости физических характеристик материала от остаточных параметров. Поскольку речь идет о характеристиках представительного объема, воспользуемся элементами термодинамики необратимых процессов. Известно, что физические характеристики термически деполяризованной среды в отличие от среды, поляризованной до состояния насыщения, отличаются между собой. Поэтому в случае частичной поляризации они будут зависеть от остаточных параметров $\mathbf{P}_0, \boldsymbol{\varepsilon}_0$, и будут меняться с изменением этих параметров. Найдем уравнения, связывающие обратимые искоемые параметры $\mathbf{P}_e, \boldsymbol{\varepsilon}_e$ с определяющими параметрами $\mathbf{E}$ и σ . С этой целью воспользуемся уравнениями первого и второго начала термодинамики необратимых процессов в дифференциальной форме [1]:

$$\begin{aligned} \rho \dot{u} &= \sigma : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} + \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{D}} - \nabla \cdot \mathbf{q} + \rho \omega, \\ \rho \dot{s} &\geq \frac{\rho \omega}{T} - \frac{\nabla \cdot \mathbf{q}}{T} - \mathbf{q} \cdot \nabla \left(\frac{1}{T} \right), \end{aligned} \quad (1)$$

где $\rho, u, \sigma, \boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{E}, \mathbf{D}, \mathbf{q}, \omega, s, T, \nabla$ – плотность массы, массовая плотность внутренней энергии, тензор напряжений, тензор деформаций, вектор электрического поля, вектор электрической индукции, вектор потока тепла, мощность внутренних источников тепла, массовая плотность энтропии, абсолютная температура, набла оператор Гамильтона соответственно. Точка сверху обозначает субстанциональную производную по времени. Но так как все деформации малы, то справедливы гипотезы геометрически линейной механики, откуда следует, что субстанциональная производная совпадает с частной производной.

Внутренняя энергия является функцией внешних параметров и энтропии $u(\boldsymbol{\varepsilon}_e, \mathbf{D}_e, s)$, $\mathbf{D}_e = \mathbf{P}_e + \varepsilon_* \mathbf{E}$, где ε_* – диэлектрическая проницаемость вакуума. Чтобы определяющие параметры стали независимыми, введем термодинамическую функцию Гиббса

$$G = u - Ts - \frac{1}{\rho} \sigma : \dot{\boldsymbol{\varepsilon}} - \frac{1}{\rho} \mathbf{E} \cdot \dot{\mathbf{D}}$$

и проведем стандартные действия, связанные с исключением из соотношений (1)

мощности внутренних источников тепла. Получим неравенство диссипации, в котором для случая процесса холодной поляризации можно пренебречь термическими слагаемыми ($\mathbf{q}$, s , T), и которое можно записать в виде

$$-(\rho G_{,\sigma} + \varepsilon) : \dot{\sigma} - (\rho G_{,E} + \mathbf{D}) \cdot \dot{E} - \rho G_{,\varepsilon_0} : \dot{\varepsilon}_0 - \rho G_{,P_0} \cdot \dot{P}_0 = S_i \geq 0. \quad (2)$$

Динамика переключения диполей составляет менее 10^{-11} с. Процесс переключения домена имеет временной масштаб порядка $10^{-8} - 10^{-5}$ с. Поэтому, когда напряжение и электрическое поле изменяются в пределах $10^{-1} - 10^{-2}$ с, имеем квазистатический процесс и малые отклонения от термодинамического равновесия. Тогда функцию скорости диссипации S_i можно рассматривать как линейную относительно скоростей своих параметров, т.е.

$$S_i = \chi_\varepsilon^S : \dot{\sigma} + \chi_D^S \cdot \dot{E} + \chi_{\varepsilon_0}^S : \dot{\varepsilon}_0 + \chi_{P_0}^S \cdot \dot{P}_0. \quad (3)$$

Обобщенные диссипативные силы χ_ε^S , χ_D^S , $\chi_{\varepsilon_0}^S$, $\chi_{P_0}^S$ в общем случае представляют собой функции, которые зависят от набора параметров σ , E , ε_0 , P_0 , равно как и от скоростей этих параметров $\dot{\sigma}$, $\dot{E}$, $\dot{\varepsilon}_0$, $\dot{P}_0$, причем они должны обеспечивать выполнение неравенства скорости диссипации (2).

Для керамических материалов обратимые части деформации и поляризации ε_e , P_e достаточно малы (приблизительно на порядок меньше остаточных параметров), в силу чего определяющие соотношения естественно строить в виде линейных соотношений. С этой целью конкретизируем функцию Гиббса, выбрав ее в квадратичном виде:

$$G = -\frac{1}{\rho}(\sigma : \varepsilon_0 + E \cdot P_0) - \frac{1}{2\rho}[\sigma : S(\varepsilon_0, P_0) : \sigma + 2E \cdot d(\varepsilon_0, P_0) : \sigma + E \cdot \varepsilon(\varepsilon_0, P_0) \cdot E]. \quad (4)$$

Входящие сюда упругие податливости, пьезоэлектрические модули и диэлектрические проницаемости являются функциями остаточных параметров $S = S(\varepsilon_0, P_0)$, $d = d(\varepsilon_0, P_0)$, $\varepsilon = \varepsilon(\varepsilon_0, P_0)$ и обладают следующими свойствами симметрии $S = S^{T(12)} = S^{T(34)} = S^{T((12),(34))}$, $d = d^{T(23)}$, $\varepsilon = \varepsilon^{T(12)}$. Воспользовавшись независимостью обобщенных скоростей $\dot{\sigma}$, $\dot{E}$, $\dot{\varepsilon}_0$, $\dot{P}_0$ и проведя стандартные математические операции в (2) на основании (4), получаем две пары соотношений. Первая пара связывает тензор деформаций и вектор электрической индукции с тензором механических напряжений, вектором электрического поля и первой парой диссипативных сил. Вторая пара уравнений связывает тензор механических напряжений, вектор электрического поля и производные модулей физических характеристик по остаточным параметрам со второй парой диссипативных сил. Избегая чрезмерного обобщения, будем пренебрегать вязкоупругими свойствами, для чего надо положить $\chi_\varepsilon^S = 0$, $\chi_D^S = 0$. Тогда первую пару уравнений можно представить в виде

$$\begin{aligned} \varepsilon - \varepsilon_0 &= S(\varepsilon_0, P_0) : \sigma + d^T(\varepsilon_0, P_0) \cdot E, \\ D - P_0 &= d(\varepsilon_0, P_0) : \sigma + \varepsilon(\varepsilon_0, P_0) \cdot E, \end{aligned} \quad (5)$$

где для тензора пьезомодулей $d^T = d^{T(1,(23))}$. Вторую пару уравнений можно записать так:

$$\begin{aligned}
& \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_0} \right)^{T((34),(56))} : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{E} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{d}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_0} \right)^{T((23),(45))} : \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_0} \right)^{T(2,(34))} \cdot \mathbf{E} = \boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^S, \\
& \mathbf{E} + \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} : \left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{P}_0} \right)^{T((34),5)} : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{E} \cdot \left(\frac{\partial \mathbf{d}}{\partial \mathbf{P}_0} \right)^{T((23),4)} : \boldsymbol{\sigma} + \frac{1}{2} \mathbf{E} \cdot \left(\frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \mathbf{P}_0} \right)^{T(2,3)} \cdot \mathbf{E} = \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^S.
\end{aligned} \quad (6)$$

Учитывая, что $\mathbf{D} - \mathbf{P}_0 = \mathbf{D}_e$, $\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\varepsilon}_0 = \boldsymbol{\varepsilon}_e$, можно сказать, что (5) представляют собой определяющие соотношения для обратимых параметров. Остается только выяснить характер зависимости физических характеристик от остаточных параметров. С этой целью рассмотрим обобщенные диссипативные силы $\boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^S, \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^S$, входящие в систему (6). Для необратимых процессов мы не вправе считать, что они являются аналитическими функциями своих аргументов. Сделаем предположение, что они состоят как из аналитической, так и неаналитической частей, входящих аддитивным образом, с обязательным выполнением неравенства (2).

Обозначим аналитические части через $\boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(an)}, \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(an)}$, а неаналитические – $\boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(na)}, \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(na)}$, тогда

$$\boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^S = \boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(an)} + \boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(na)}, \quad \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^S = \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(an)} + \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(na)}.$$

Очевидно, что аналитические части не могут зависеть от остаточных параметров, поэтому они будут функциями только внешних параметров:

$$\boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(an)} = \boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(an)}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E}), \quad \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(an)} = \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(an)}(\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E}).$$

Надо также отметить, что при отсутствии внешних нагрузок эти функции равны нулю. Все это позволяет разложить их в ряд Тейлора в окрестности ненагруженного состояния. Выполнив такое разложение с точностью до квадратичных составляющих и введя для удобства записи дальнейших формул соответствующие (6) операции транспонирования, для тензоров такого разложения получим

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(an)} &= \mathbf{A} : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{E} + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{K}^{T((34),(56))} : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{M}^{T(2,(34))} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{N}^{T((23),(45))} : \boldsymbol{\sigma}, \\
\boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(an)} &= \mathbf{A}_1 : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{B}_1 \cdot \mathbf{E} + \boldsymbol{\sigma} : \mathbf{K}_1^{T((34),(56))} : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{M}_1^{T(2,(34))} \cdot \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \mathbf{N}_1^{T((23),(45))} : \boldsymbol{\sigma}.
\end{aligned}$$

Тензоры $\mathbf{B}_1 \in T_2$; $\mathbf{B}, \mathbf{A}_1, \mathbf{M}_1 \in T_3$; $\mathbf{A}, \mathbf{M}, \mathbf{N}_1 \in T_4$; $\mathbf{N}, \mathbf{K}_1 \in T_5$, $\mathbf{K} \in T_6$ не зависят от остаточных $\boldsymbol{\varepsilon}_0, \mathbf{P}_0$ и от определяющих параметров $\boldsymbol{\sigma}, \mathbf{E}$. Введенные аналитические части диссипативных сил никак не изменяют неравенство диссипации (2), они лишь исключают из функции скорости диссипации слагаемые, которые не влияют на диссипацию энергии. Подставляя эти разложения в (6) и учитывая независимость определяющих параметров, получаем систему равенств, которые связывают эти параметры с неаналитическими частями диссипативных сил $\boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(na)}, \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(na)}$ и с производными физических характеристик, т.е. имеем

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{A} : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{B} \cdot \mathbf{E} + \boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\varepsilon}_0}^{S(na)}, \quad \mathbf{E} = \mathbf{A}_1 : \boldsymbol{\sigma} + \mathbf{B}_1 \cdot \mathbf{E} + \boldsymbol{\chi}_{\mathbf{P}_0}^{S(na)}, \quad (7)$$

$$\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_0} = \mathbf{K}, \quad \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_0} = \mathbf{N}, \quad \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}_0} = \mathbf{M}, \quad \frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{P}_0} = \mathbf{K}_1, \quad \frac{\partial \mathbf{d}}{\partial \mathbf{P}_0} = \mathbf{N}_1, \quad \frac{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}{\partial \mathbf{P}_0} = \mathbf{M}_1. \quad (8)$$

Соотношения (7) описывают изменение необратимых параметров. Однако построение неаналитических частей обобщенных диссипативных сил представляет собой очень сложную задачу, которая, по-видимому, даже в простейших случаях не решена. Вместо этого для нахождения необратимых параметров применяются другие методы и подходы [18], с условием удовлетворения неравенству (2).

Однако для наших целей важны соотношения (8), которые позволяют сформулировать линейную зависимость тензоров $S(\epsilon_0, P_0)$, $d(\epsilon_0, P_0)$, $\epsilon(\epsilon_0, P_0)$ от остаточных параметров с точностью до постоянных тензоров S_0, d_0, ϵ_0 :

$$\begin{aligned} S(\epsilon_0, P_0) &= S_0 + K : \epsilon_0 + K_1 \cdot P_0, \\ d(\epsilon_0, P_0) &= d_0 + N : \epsilon_0 + N_1 \cdot P_0, \\ \epsilon(\epsilon_0, P_0) &= \epsilon_0 + M : \epsilon_0 + M_1 \cdot P_0. \end{aligned} \quad (9)$$

Очевидно, что в полученных соотношениях S_0, ϵ_0 – тензоры упругих податливостей и диэлектрических проницаемостей для термически деполяризованной керамики, когда $\epsilon_0 = 0, P_0 = 0$. В деполяризованном состоянии керамика не обладает пьезоэлектрическими свойствами, поэтому $d_0 = 0$. Простые рассуждения позволяют еще больше упростить эти соотношения, рассмотрев ситуации с изменением направления вектора остаточной поляризации. Действительно, если направление вектора остаточной поляризации изменить на противоположное, то тензор остаточной деформации не изменится. Соответственно тензор упругих податливостей и тензор диэлектрических проницаемостей также не изменятся, в отличие от тензора пьезоэлектрических модулей, который поменяет знак на противоположный. Отсюда сразу же вытекают следующие равенства:

$$K_1 = 0, \quad M_1 = 0, \quad N = 0.$$

Следовательно, вместо (9) имеем:

$$\begin{aligned} S(\epsilon_0) &= S_0 + K : \epsilon_0, \\ d(P_0) &= N_1 \cdot P_0, \\ \epsilon(\epsilon_0) &= \epsilon_0 + M : \epsilon_0. \end{aligned} \quad (10)$$

Тензоры упругих податливостей и диэлектрических проницаемостей для термически деполяризованной керамики S_0, ϵ_0 должны быть определены до начала процесса поляризации. Соотношения (10) составляют одну из главных частей исследования. Остается лишь конкретизировать компоненты входящих в них тензоров.

2. Обсуждение результатов

Тензоры K, N_1, M методами термодинамики определить уже невозможно, здесь, как и при определении физических характеристик материала, необходимы экспериментальные методы. Заметим, что эти тензоры, будучи связанными с физическими модулями, должны обладать такими же свойствами симметрии, как и тензоры физических модулей S, d, ϵ . Кроме того, K, M должны быть симметричными по последней паре индексов, что вытекает из (8), в силу дифференцирования физических характеристик по симметричному тензору остаточной деформации. Это обстоятельство позволяет вместо тензорного представления воспользоваться матричным представлением Фойхта. Используя декартову прямоуголь-

ную систему координат, введем векторы

$$\hat{\mathbf{e}}_0 = \{\varepsilon_{011}, \varepsilon_{022}, \varepsilon_{033}, 2\varepsilon_{023}, 2\varepsilon_{013}, 2\varepsilon_{012}\}, \quad \hat{\mathbf{P}}_0 = \{P_{01}, P_{02}, P_{03}\}.$$

Тензорам $\mathbf{K} \in T_6$, $\mathbf{N}_1, \mathbf{M}, \mathbf{S}, \mathbf{S}_0 \in T_4$, $\mathbf{d} \in T_3$, $\mathfrak{z}, \mathfrak{z}_0 \in T_2$ поставим в соответствие матрицы $\hat{\mathbf{K}}, \hat{\mathbf{N}}_1, \hat{\mathbf{M}}, \hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{S}}_0, \hat{\mathbf{d}}, \hat{\mathfrak{z}}, \hat{\mathfrak{z}}_0$ по следующему правилу:

$$K_{(mn)(ks)(pt)} \Rightarrow \hat{K}_{\alpha\beta\gamma}, \quad N_{1m(nk)s} \Rightarrow \hat{N}_{1m\alpha s}, \quad M_{mn(ks)} \Rightarrow \hat{M}_{m\alpha s}, \quad S_{(mn)(ks)} \Rightarrow \hat{S}_{\alpha\beta}, \\ S_{(mn)(ks)} \Rightarrow \hat{S}_{0\alpha\beta}, \quad d_{m(nk)} \Rightarrow \hat{d}_{m\alpha}, \quad \mathfrak{z}_{mn} \Rightarrow \hat{\mathfrak{z}}_{mn}, \quad \mathfrak{z}_{mn} \Rightarrow \hat{\mathfrak{z}}_{0mn},$$

где в скобках выделены пары латинских индексов, которые заменяются на один греческий, а α, β, γ определяются по одному и тому же правилу, например:

$$\alpha = \begin{cases} m, & m = n; \\ 9 - (m + n), & m \neq n. \end{cases}$$

Вначале определяются компоненты матриц $\hat{\mathbf{S}}_0, \hat{\mathfrak{z}}_0$. С этой целью отметим [1], что, термически деполяризованная керамика является изотропным телом. Поэтому, проведя два упругих и один электрический эксперимент, можно полностью определить компоненты этих матриц. Действительно, среди упругих экспериментов наиболее простыми являются статические эксперименты по определению модуля Юнга E и коэффициента Пуассона ν , а в качестве электрического эксперимента – эксперимент по определению диэлектрической проницаемости пластинки ε_0 . Тогда компоненты матриц $\hat{\mathbf{S}}_0, \hat{\mathfrak{z}}_0$ определяются как

$$\hat{S}_{011} = \hat{S}_{011} = \hat{S}_{011} = \frac{1}{E}; \quad \hat{S}_{012} = \hat{S}_{013} = \hat{S}_{023} = -\frac{\nu}{E}; \\ \hat{S}_{044} = \hat{S}_{055} = \hat{S}_{066} = \frac{2(1+\nu)}{E}; \quad \hat{\mathfrak{z}}_{011} = \hat{\mathfrak{z}}_{011} = \hat{\mathfrak{z}}_{011} = \varepsilon_0. \quad (11)$$

Для определения остальных матриц воспользуемся также известными значениями упругих податливостей и диэлектрических проницаемостей поляризованной до насыщения керамики $\hat{\mathbf{S}}_{\text{sat}}, \hat{\mathbf{d}}_{\text{sat}}, \hat{\mathfrak{z}}_{\text{sat}}$. Известно [1], что поляризованная электрическим полем до насыщения керамика относится к классу трансверсально-изотропного тела и ее матрицы констант в системе координат, когда ось Oz направлена по вектору остаточной поляризации, имеют следующий вид:

$$\hat{\mathbf{S}}_{\text{sat}} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & 0 & 0 & 0 \\ S_{12} & S_{11} & S_{13} & 0 & 0 & 0 \\ S_{13} & S_{13} & S_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & S_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 2(S_{11} - S_{12}) \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{d}}_{\text{sat}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (12) \\ \hat{\mathfrak{z}}_{\text{sat}} = \begin{pmatrix} \mathfrak{z}_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \mathfrak{z}_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \mathfrak{z}_{33} \end{pmatrix}.$$

Одна из главных осей тензора деформации совпадает с осью Oz , а две другие лежат в плоскости Oxy . Поэтому будем определять компоненты матриц тензоров $\hat{\mathbf{K}}, \hat{\mathbf{N}}_1, \hat{\mathbf{M}}$ в этих осях. Обратимся вначале к матрице $\hat{\mathbf{K}}$. С этой целью рассмотрим матрицу $\hat{\mathbf{K}} \cdot \hat{\mathbf{e}}_0$. В состоянии, когда керамика поляризована до состояния насыщения, компоненты $\hat{\mathfrak{e}}_{01}, \hat{\mathfrak{e}}_{02}, \hat{\mathfrak{e}}_{03}$ являются главными значениями тензора остаточной деформации, удовлетворяющими условию $\hat{\mathfrak{e}}_{01} \leq \hat{\mathfrak{e}}_{02} \leq \hat{\mathfrak{e}}_{03}$. Как следует из экспе-

риментальных данных, тензор остаточных деформаций является несжимаемым, тогда из матричного равенства $\hat{\mathbf{S}}_{\text{sat}} = \hat{\mathbf{S}}_0 + \hat{\mathbf{K}} \cdot \hat{\mathbf{\epsilon}}_0$ следует, что:

$$S_{\alpha\beta} = \hat{S}_{0\alpha\beta} + \hat{K}_{\alpha\beta 1} \hat{\epsilon}_{01} + \hat{K}_{\alpha\beta 2} \hat{\epsilon}_{02} + \hat{K}_{\alpha\beta 3} \hat{\epsilon}_{03}, \quad \hat{\epsilon}_{01} = \hat{\epsilon}_{02} = -\frac{\epsilon_{\text{sat}}}{2}, \quad \hat{\epsilon}_{03} = \epsilon_{\text{sat}},$$

где ϵ_{sat} – осевая деформация вдоль направления поляризации в состоянии насыщения. Естественнo считать, что всем $S_{\alpha\beta} = 0$ будут отвечать $\hat{K}_{\alpha\beta\gamma} = 0$, $\forall \gamma$. Так как поворот осей вокруг оси Oz не влияет на все главные значения, а главные значения деформаций в плоскости Oxy равны между собой, можно считать, что $\hat{K}_{\alpha\beta 1} = \hat{K}_{\alpha\beta 2} = 1/\sigma_0$, $\hat{K}_{\alpha\beta 3} = m_{\alpha\beta} \hat{K}_{\alpha\beta 1} = m_{\alpha\beta}/\sigma_0$, где σ_0 – некоторый множитель, размерность которого совпадает с размерностью механического напряжения. Тогда $S_{\alpha\beta} = \hat{S}_{0\alpha\beta} + \epsilon_{\text{sat}}(-1 + m_{\alpha\beta})/\sigma_0$. Отсюда определяем $m_{\alpha\beta}$, после чего находим

$$\hat{S}_{\alpha\beta}(\epsilon_0) = \hat{S}_{0\alpha\beta} + (\hat{\epsilon}_{01} + \hat{\epsilon}_{02} + m_{\alpha\beta} \hat{\epsilon}_{03})/\sigma_0, \quad m_{\alpha\beta} = 1 + \frac{(S_{\alpha\beta} - \hat{S}_{0\alpha\beta})\sigma_0}{\epsilon_{\text{sat}}}.$$

В этих соотношениях $\hat{\epsilon}_{01} + \hat{\epsilon}_{02} + \hat{\epsilon}_{03} = 0$, так как это первый инвариант и выполняются условия несжимаемости. В силу этого неопределенный множитель σ_0 уходит, а выражение принимает вид

$$\hat{S}_{\alpha\beta}(\epsilon_0) = \hat{S}_{0\alpha\beta} + \frac{(S_{\alpha\beta} - \hat{S}_{0\alpha\beta})}{\epsilon_{\text{sat}}} \hat{\epsilon}_{03}. \quad (12)$$

Отметим, что сюда входит лишь наибольшее главное значение тензора остаточной деформации, а все компоненты матриц в правой части по (11), (12) полностью известны. Аналогичные рассуждения позволяют найти матрицу $\mathbf{M}$ и определить изменяющиеся диэлектрические проницаемости:

$$\hat{\epsilon}_{mn}(\epsilon_0) = \hat{\epsilon}_{0mn} + \frac{(\hat{\epsilon}_{mn} - \hat{\epsilon}_{0mn})}{\epsilon_{\text{sat}}} \hat{\epsilon}_{03}. \quad (13)$$

Остается найти матрицу $\hat{\mathbf{N}}_1$, после чего определить пьезоэлектрические модули. С этой целью рассмотрим ту же систему координат и состояние полной поляризации, тогда компоненты матричного равенства $\hat{\mathbf{d}}_{\text{sat}} = \hat{\mathbf{N}}_1 \cdot \hat{\mathbf{P}}_0$:

$$d_{m\alpha} = N_{1m\alpha 1} \hat{P}_{01} + N_{1m\alpha 2} \hat{P}_{02} + N_{1m\alpha 3} \hat{P}_{03}, \quad \hat{P}_{01} = \hat{P}_{02} = 0, \quad \hat{P}_{03} = p_{\text{sat}},$$

где p_{sat} – поляризация в состоянии насыщения. Опуская схожие рассуждения, можем окончательно записать:

$$\hat{d}_{m\alpha}(P_0) = \frac{\hat{P}_{03}}{p_{\text{sat}}} d_{m\alpha}. \quad (14)$$

Соотношения (12) – (14) полностью определяют физические характеристики материала в необратимом процессе деформирования и поляризации.

Соотношения (12), (13) надо рассматривать в локальной системе координат, оси которой совпадают с главными осями тензора остаточной деформации, когда ось Oz направлена по третьему главному направлению и направлена по вектору остаточной поляризации.

3. Заключение

Необратимые процессы в поликристаллических сегнетоэлектрических средах связаны с внутренней перестройкой структуры материала, что приводит к изменению и механических и электрических свойств материала. Изменяются не только пьезоэлектрические модули, но и упругие податливости и диэлектрические проницаемости. Если моделируется необратимый процесс поляризации и деформирования, то необходимо знать функциональную зависимость этих модулей от изменяющихся остаточных деформаций, равно как и от остаточной поляризации. Очевидно, что физические материальные характеристики должны определяться для представительного объема, включающего в себя множество микроструктурных особенностей в виде кристаллитов и доменов. Для таких объемов можно использовать элементы термодинамики необратимых процессов, что и было сделано в настоящей работе. Основным моментом в таком подходе явилось аддитивное представление диссипативных сил при скоростях остаточных параметров в виде аналитической и неаналитической частей. Именно это позволило конкретизировать аналитические части и построить линейные тензорные соотношения относительно остаточных параметров для физических характеристик материала. С помощью простого анализа проведена конкретизация этих зависимостей: в частности, выяснилось, что упругие податливости и диэлектрические проницаемости зависят от деформаций, в то время как пьезомодули зависят от поляризации, что наглядно продемонстрировано соотношениями (10). Входящие в них тензоры с постоянными компонентами имеют высокие ранги, что оказывает существенное влияние на их определение. Очевидно, что методами термодинамики определить эти коэффициенты не представляется возможным. Поэтому были задействованы данные двух состояний керамики, когда она деполяризована и поляризована до состояния насыщения. И в том и в другом случае физические модули материала известны и их можно найти в справочной литературе для конкретного типа керамики. Реже встречаются данные для деполяризованного состояния. В этом случае предложено находить модули экспериментальным путем. При определении неизвестных величин были сделаны очевидные предположения о нулевых значениях некоторых компонентов тензоров из простых соображений анизотропии. Еще одна порция предположений сделана на основе имеющихся экспериментальных данных об осевой симметрии, несжимаемости и взаимовлияний полей. В итоге были получены соотношения (12) – (14), представляющие собой искомые функциональные зависимости. Входящие в них характеристики материала в деполяризованном состоянии и поляризованном до состояния насыщения материала определяются по (11), (12).

Подводя итоги, можно сказать, что, во-первых, построены определяющие соотношения (5), которые необходимы при моделировании необратимых процессов. Они представляют собой линейные тензорные соотношения, связывающие $\mathbf{D}_e, \epsilon_e$ с определяющими параметрами $\mathbf{E}$ и $\boldsymbol{\sigma}$. В них входят тензоры физических характеристик $\mathbf{S}(\epsilon_0), \mathbf{d}(\mathbf{P}_0), \mathbf{z}(\epsilon_0)$, меняющиеся в процессе эволюции остаточной деформации и поляризации. Интересно отметить, что в определяющих соотношениях линейная зависимость сохраняется при любых значениях и ориентации остаточных параметров $\epsilon_0, \mathbf{P}_0$. Во-вторых, исследованы функциональные зависимости физических модулей от остаточных параметров, которые представлены соотношениями (10). Этими соотношениями доказано, что физические характеристики частично поляризованного или деполяризованного тела, равно как и в случае не-

однородной поляризации, зависят линейным образом от остаточной деформации и остаточной поляризации. И наконец, выбраны компоненты постоянных тензоров по известным данным двух состояний материала. Интересно также отметить, что соотношения (14) полностью совпадают с данными работ [5, 9], а соотношения (12), (13) получены впервые.

ЛИТЕРАТУРА

1. Белоконь А.В., Скалчих А.С. Математическое моделирование необратимых процессов поляризации. М.: Физматлит, 2010.
2. Huber J.E., Fleck N.A. Multi-axial electrical switching of a ferroelectric: theory versus experiment // J. Mechanics and Physics of Solids. 2001. No. 49. P. 785–811. DOI: 10.1016/S0022-5096(00)00052-1.
3. Kamlah M., Bohle U. Finite element analysis of piezoceramic components taking into account ferroelectric hysteresis behavior // Int. J. Solids and Structures. 2001. No. 38. P. 605–633. DOI: 10.1016/S0020-7683(00)00055-X.
4. McMeeking R.M., Landis C.M. A phenomenological multi-axial constitutive law for switching in polycrystalline ferroelectric ceramics // Int. J. Engineering Science. 2002. No. 40. P. 1553–1577. DOI: 10.1016/S0020-7225(02)00033-2.
5. Landis C.M. Fully coupled, multi-axial, symmetric constitutive laws for polycrystalline ferroelectric ceramics // J. Mechanics and Physics of Solids. 2002. No. 50. P. 127–152. DOI: 10.1016/S0022-5096(01)00021-7.
6. Haug A., Knoblauch V., McMeeking R.M. Combined isotropic and kinematic hardening in phenomenological switching models for ferroelectric ceramics // Int. J. Engineering Science. 2003. No. 41. P. 867–901. DOI: 10.1016/S0020-7225(02)00320-8.
7. Elhadrouz M., Zineb T.B., Patoor E. Constitutive Law for Ferroelastic and Ferroelectric Piezoceramics // J. Intelligent Material Systems and Structures. 2005. V. 16. P. 221–236. DOI: 10.1177/1045389X05049650.
8. Muller R., Schroder J., Lupascu D.C. Thermodynamic consistent modelling of defects and microstructures in ferroelectrics // GAMM-Mitt. 31. 2008. No. 2. P. 133–150. DOI: 10.1002/gamm.200890007.
9. Huber J.E., Fleck N.A. Ferroelectric switching: a micromechanics model versus measured behaviour // European J. Mechanics A/Solids. 2004. No. 23. P. 203–217. DOI: 10.1016/j.euromechsol.2003.11.006.
10. Kamlah M., Liskowsky A.C., McMeeking R.M., Balke H. Finite element simulation of a polycrystalline ferroelectric based on a multidomain single crystal switching model // Int. J. Solids and Structures. 2005. No. 42. P. 2949–2964. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2004.09.045.
11. Haug A., Onck P.R., Giessen E.V. Development of inter- and intragranular stresses during switching of ferroelectric polycrystals // Int. J. Solids and Structures. 2007. No. 44. P. 2066–2078. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2006.07.024.
12. Pane I., Fleck N.A., Chu D.P., Huber J.E. The influence of mechanical constraint upon the switching of a ferroelectric memory capacitor // European J. Mechanics A/Solids. 2009. No. 28. P. 195–201. DOI: 10.1016/j.euromechsol.2008.09.002.
13. Jayabal K., Menzel A., Arockiarajan A., Srinivasan S.M. Micromechanical modelling of switching phenomena in polycrystalline piezoceramics. Application of a polygonal finite element approach // Computational Mechanics. 2011. V. 48. No. 4. P. 421–435. DOI: 10.1007/s00466-011-0595-4.
14. Daniel L., Hall D.A., Withers P.J. A multiscale model for reversible ferroelectric behavior of polycrystalline ceramics // Mechanics of Materials. 2014. No. 71. P. 85–100. DOI: 10.1016/j.mechmat.2014.01.006.
15. Aleshin V.I., Luchaninov A.G. Modeling of domain processes in piezoceramic materials // Ferroelectrics. 2002. V. 266. P. 111–124. <https://doi.org/10.1080/00150190211447>. DOI: 10.1080/00150190211447.

16. Smith R.C., Ounaies Z. A Domain Wall Model for Hysteresis in Piezoelectric Materials // J. Intelligent Material Systems and Structures. 2000. V. 11. No. 1. P. 62–79. DOI: 10.1106/HPHJ-UJ4D-E9D0-2MDY.
17. Осипова Н.Г., Семёнов А.С. Моделирование нелинейного поведения пьезокерамики тетрагональной структуры методами конечно-элементной гомогенизации // Научно-технические ведомости СПбГПУ, физико-математические науки. Санкт-Петербург. 2011. № 4(134). С. 56–64.
18. Skaliukh A. About Mathematical Models of Irreversible Polarization Processes of a Ferroelectric and Ferroelastic Polycrystals // Ferroelectrics and Their Applications / Husein Irzaman (ed). IntechOpen. DOI: 10.5772/intechopen.78262. URL: <https://www.intechopen.com/books/ferroelectrics-and-their-applications/about-mathematical-models-of-irreversible-polarization-processes-of-a-ferroelectric-and-ferroelastic>

Статья поступила 10.10.18

Skaliukh A.S. (2019) FUNCTIONAL DEPENDENCE OF THE PHYSICAL CHARACTERISTICS ON IRREVERSIBLE PARAMETERS UNDER ELECTROMECHANICAL ACTION ON THE FERROELECTRIC CERAMICS. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika* [Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics]. 58. pp. 128–141

DOI 10.17223/19988621/58/11

Keywords: constitutive equations, strain, polarization, ferroelectrics, ferroelastics, induced and residual parameters, irreversible process.

The main purpose of the work is to study the functional dependences of the material physical characteristics on the residual parameters of strain and polarization for irreversible process of polarization and strain. The dissipative forces in the inequality for dissipation are presented as a sum of analytical and non-analytical parts. Expansion of the analytical parts in powers of determining parameters provides the differential equations, which, being integrated, yield the unknown functional dependences. Integration constants represent the physical modules of a depolarized state. The tensor components of expansion in powers are determined by using elastic compliance modules, piezoelectric modules, and dielectric constants of two states: thermally depolarized ceramics and ceramics polarized up to saturation. As a result, the constitutive equations for reversible parameters were obtained as linear tensor equations with material elastic, piezoelectric, and dielectric properties representing tensor functions studied above.

Financial support. This study was supported by Russian Foundation for Basic Research (RFBR) under the research project № 17-08-00860-a.

SKALIUKH Alexander Sergeevich (Candidate of Physics and Mathematics, Institute of Mathematics, Mechanics and Computer Sciences named after I.I. Vorovich, Southern Federal University, Rostov-on-Don, Russian Federation)

REFERENCES

1. Belokon' A.V., Skaliukh A.S. (2010) *Matematicheskoe modelirovanie neobratimyykh protsessov polarizatsii* [Mathematical modeling of irreversible processes of polarization]. Moscow: Fizmatlit.
2. Huber J.E., Fleck N.A. (2001) Multi-axial electrical switching of a ferroelectric: theory versus experiment. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 49. pp. 785–811. DOI: 10.1016/S0022-5096(00)00052-1.
3. Kamlah M., Bohle U. (2001) Finite element analysis of piezoceramic components taking into account ferroelectric hysteresis behavior. *International Journal of Solids and Structures*. 38. pp. 605–633. DOI: 10.1016/S0020-7683(00)00055-X.

4. McMeeking R.M., Landis C.M. (2002) A phenomenological multi-axial constitutive law for switching in polycrystalline ferroelectric ceramics. *International Journal of Engineering Science*. 40. pp. 1553–1577. DOI: 10.1016/S0020-7225(02)00033-2.
5. Landis C.M. (2002) Fully coupled, multi-axial, symmetric constitutive laws for polycrystalline ferroelectric ceramics. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 50. pp. 127–152. DOI: 10.1016/S0022-5096(01)00021-7.
6. Haug A., Knoblauch V., McMeeking R.M. (2003) Combined isotropic and kinematic hardening in phenomenological switching models for ferroelectric ceramics. *International Journal of Engineering Science*. 41. pp. 887–901. DOI: 10.1016/S0020-7225(02)00320-8.
7. Elhadrouz M., Zineb T.B., Patoor E. (2005) Constitutive law for ferroelastic and ferroelectric piezoceramics. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. 16. pp. 221–236. DOI: 10.1177/1045389X05049650.
8. Muller R., Schroder J., Lupascu D.C. (2008) Thermodynamic consistent modelling of defects and microstructures in ferroelectrics. *GAMM-Mitteilungen*. 31(2). pp. 133–150. DOI: 10.1002/gamm.200890007.
9. Huber J.E., Fleck N.A. (2004) Ferroelectric switching: a micromechanics model versus measured behavior. *European Journal of Mechanics A/Solids*. 23. pp. 203–217. DOI: 10.1016/j.euromechsol.2003.11.006.
10. Kamlah M., Liskowsky A.C., McMeeking R.M., Balke H. (2005) Finite element simulation of a polycrystalline ferroelectric based on a multidomain single crystal switching model. *International Journal of Solids and Structures*. 42. pp. 2949–2964. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2004.09.045.
11. Haug A., Onck P.R., Giessen E. (2007) Development of inter- and intragranular stresses during switching of ferroelectric polycrystals. *International Journal of Solids and Structures*. 44. pp. 2066–2078. DOI: 10.1016/j.ijsolstr.2006.07.024.
12. Pane I., Fleck N.A., Chu D.P., Huber J.E. (2009) The influence of mechanical constraint upon the switching of a ferroelectric memory capacitor. *European Journal of Mechanics A/Solids*. 28. pp. 195–201. DOI: 10.1016/j.euromechsol.2008.09.002.
13. Jayabal K., Menzel A., Arockiarajan A., Srinivasan S.M. (2011) Micromechanical modelling of switching phenomena in polycrystalline piezoceramics. Application of a polygonal finite element approach. *Computational Mechanics*. 48(4). pp. 499–514. DOI: 10.1007/s00466-011-0595-4.
14. Daniel L., Hall D.A., Withers P.J. (2014) A multiscale model for reversible ferroelectric behaviour of polycrystalline ceramics. *Mechanics of Materials*. 71. pp. 85–100. DOI: 10.1016/j.mechmat.2014.01.006.
15. Aleshin V.I., Luchaninov A.G. (2002) Modeling of domain processes in piezoceramic materials. *Ferroelectrics*. 266. pp. 111–124. DOI: 10.1080/00150190211447.
16. Smith R.C., Ounaies Z. (2000) A domain wall model for hysteresis in piezoelectric materials. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*. 11(1). pp. 62–79. DOI: 10.1106/HPHJ-UJ4D-E9D0-2MDY.
17. Osipova N.G., Semionov A.S. (2011) Modelirovanie nelineynogo povedeniya p'ezokeramiki tetragonal'noy struktury metodami konechno-elementnoy gomogenizatsii [Simulation of the nonlinear behavior of ferroelectric ceramics with tetragonal structure by finite-element homogenizing]. *Nauchno-tekhnicheskie vedomosti SPbGPU. Fiziko-matematicheskie nauki – St. Petersburg Polytechnic University Journal - Physics and Mathematics*. 4(134). pp. 56–64.
18. Skaliukh A. (2018) About Mathematical Models of Irreversible Polarization Processes of a Ferroelectric and Ferroelastic Polycrystals. In «Ferroelectrics and Their Applications». IntechOpen. DOI: 10.5772/intechopen.78262. URL: <https://www.intechopen.com/books/ferroelectrics-and-their-applications/about-mathematical-models-of-irreversible-polarization-processes-of-a-ferroelectric-and-ferroelastic>.

Received: October 10, 2018

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

БЕРЕЗОВСКИЙ Юрий Сергеевич – руководитель отдела ОАО «ТомскНИПИнефть», аспирант Томского политехнического университета, г. Томск. E-mail: yuraberez@gmail.com

БОГДАНОВА Софья Борисовна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры 311 Московского авиационного института, г. Москва. E-mail: sonjaf@list.ru

БОРЗЕНКО Евгений Иванович – кандидат физико-математических наук, доцент физико-технического факультета Томского государственного университета, г. Томск. E-mail: borzenko@ftf.tsu.ru

ГЛАДКОВ Сергей Октябрьнович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор Московского авиационного института, г. Москва. E-mail: sglad51@mail.ru

ДЬЯКОВА Ольга Алексеевна – аспирантка физико-технического факультета Томского государственного университета, г. Томск. E-mail: dyakova_o@ftf.tsu.ru

ЗЯТИКОВ Павел Николаевич – доктор технических наук, профессор, профессор кафедры разработки и эксплуатации нефтяных и газовых месторождений Инженерной школы природных ресурсов Томского политехнического университета, г. Томск. E-mail: zpavel@tpu.ru

КАРАКУЛОВ Валерий Владимирович – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры прочности и проектирования физико-технического факультета Томского государственного университета, г. Томск.

КРАЙНОВ Дмитрий Алексеевич – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник физико-технического факультета Томского государственного университета, г. Томск. E-mail: krajnov@tpu.ru

ЛЫЧАГИН Дмитрий Васильевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой минералогии и геохимии геолого-географического факультета Томского государственного университета, г. Томск. E-mail: dvl-tomsk@mail.ru

МИКУШИНА Валентина Алексеевна – аспирантка физико-технического факультета Томского государственного университета, младший научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск. E-mail: Mikushina_93@mail.ru

МОСКВИЧЕВ Евгений Николаевич – аспирант физико-технического факультета Томского государственного университета, младший научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения СО РАН, г. Томск. E-mail: em_tsu@mail.ru

ПЕРГАМЕНЧИКОВ Сергей Маркович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор лаборатории математики им. Рафаэля Салема университета Руана, Нормандия, Франция. E-mail: serge.pergamenchikov@univ-rouen.fr

ПОРЯЗОВ Василий Андреевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математической физики физико-технического факультета Томского государственного университета, г. Томск. E-mail: poryazov@mail.ru

ПЧЕЛИНЦЕВ Евгений Анатольевич – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры математического анализа и теории функций Томского государственного университета, г. Томск. E-mail: evgen-pch@yandex.ru

РУДНИЦКИЙ Олег Иванович – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры дифференциальных уравнений и геометрии факультета математики и информатики Таврической академии Крымского федерального университета им. В.И. Вернадского, г. Симферополь. E-mail: oirud58@gmail.com

РЫЛЬЦЕВА Кира Евгеньевна – аспирантка физико-технического факультета Томского государственного университета. E-mail: kiraworkst@gmail.com

СИНЕБРИХОВ Кирилл Вадимович – младший научный сотрудник ОАО «ТомскНИПИнефть», аспирант Томского политехнического университета, г. Томск. E-mail: sinebriukhov.kirill@gmail.com

СКАЛИУХ Александр Сергеевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического моделирования Института математики, механики и компьютерных наук им. И.И. Воровича Южного федерального университета, г. Ростов-на-Дону.

СКРИПНЯК Владимир Альбертович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой механики деформируемого твердого тела физико-технического факультета Томского государственного университета, г. Томск. E-mail: skrp2006@yandex.ru

СМОЛЕНЦЕВ Николай Константинович – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры фундаментальной математики Института фундаментальных наук Кемеровского государственного университета, г. Кемерово. E-mail: smolennk@mail.com

СМОЛИН Игорь Юрьевич – доктор физико-математических наук, главный научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения СО РАН; профессор Томского государственного университета, г. Томск. E-mail: smolin@ispms.ru

ТРУШКО Артем Станиславович – младший научный сотрудник ОАО «ТомскНИПИ-нефть», аспирант Томского политехнического университета, г. Томск. E-mail: astrushko@me.com

ФРОЛОВ Олег Юрьевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной газовой динамики и горения физико-технического факультета Томского государственного университета, г. Томск. E-mail: frolov@ftf.tsu.ru

ШРАГЕР Геннадий Рафаилович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной газовой динамики и горения физико-технического факультета Томского государственного университета, г. Томск. E-mail: shg@ftf.tsu.ru

Оригинал-макет подготовлен
ООО «Издательство научно-технической литературы»
634050, Томск, пл. Новособорная, 1, тел. +7(3822) 533-335

Редактор *Т.С. Портнова*
Верстка *Д.В. Фортеса*

Изд. лиц. ИД № 04000 от 12.02.2001.
Подписано к печати 12.04.2019. Выпуск в свет 30.04.2019.
Формат 70 × 100 ¹/₁₆. Бумага офсетная. Печать цифровая. Гарнитура «Таймс».
Усл. п. л. 10.16. Уч.-изд. л. 11.38. Тираж 250 экз. Заказ № 9. Цена свободная.

Отпечатано на оборудовании
Издательского Дома Томского государственного университета,
634050, г. Томск, пр. Ленина, 36, тел. (3822) 531-528, 529-849. Заказ № 3747.
<http://publish.tsu.ru> E-mail: rio.tsu@mail.ru