

**В Е С Т Н И К
ТОМСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА
МАТЕМАТИКА И МЕХАНИКА**

TOMSK STATE UNIVERSITY
JOURNAL OF MATHEMATICS AND MECHANICS

Научный журнал

2024

№ 90

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 автономное образовательное учреждение
высшего 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), И.А. Колесников (отв. секретарь по разделу «Математика»), А.Д. Сидоров (отв. секретарь по разделу «Механика»), В.Н. Берцун, В.И. Биматов, А.М. Бубенчиков, В.Г. Бутов, А.Ю. Веснин, А.Н. Ищенко, А.Ю. Крайнов, П.А. Крылов, Е.Л. Лобода, Г.О. Рябова, В.А. Скрипняк, А.В. Старченко, Е. А. Тимошенко, М.А. Шермет, 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. Pergamenshchikov, 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), Ivan A. Kolesnikov (Executive Editor of the Mathematics Section), Aleksey D. Sidorov (Executive Editor of the Mechanics Section), Vladimir N. Bertsun, Vladimir I. Bimатов, Aleksey M. Bubenchikov, Vladimir G. Butov, Igor M. Vasenin, Andrei Yu. Vesnin, Aleksandr N. Ishchenko, Aleksey Yu. Krainov, Pyotr A. Krylov, Egor L. Loboda, Galina O. Ryabova, Vladimir A. Skripnyak, Aleksandr V. Starchenko, Egor A. Timoshenko, Mikhail A. Sheremet, 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.

Внесен 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
Электронный адрес: <http://journals.tsu.ru/mathematics>
Контактный тел./факс: (3822) 529-740
E-mail: vestnik_tgu_mm@math.tsu.ru

СОДЕРЖАНИЕ

МАТЕМАТИКА

Зверев В.Г. Специальная разностная схема для решения жестких краевых задач конвективно-диффузионного переноса	5
Зубов Н.Е., Рябченко В.Н. Метод переобусловливания матричных уравнений на основе делителей нуля	18
Крылов П.А., Норбосамбуев Ц.Д. Об автоморфизмах и дифференцированиях редуцированных алгебр и коалгебр инцидентности	33
Соломатин Д.В. Прямые произведения циклических полугрупп с нулем, допускающие внешнепланарные и обобщенные внешнепланарные графы Кэли.....	40

МЕХАНИКА

Бельхеева Р.К. Малопараметрическое уравнение состояния графита для описания поведения сплошных и пористых образцов в ударных волнах и волнах разгрузки	50
Бородин В.И., Бубенчиков М.А., Бубенчиков А.М., Мамонтов М.А. Высокоточные представления Ван-дер-Ваальсовских взаимодействий	64
Глаголев В.В., Лутхов А.И. К нахождению потока удельной упругой энергии в вершину физического разреза при конечно-элементном решении	78
Евсеев Н.С., Жуков И.А., Мубаракوف Р.Г., Бельчиков И.А. Исследование физико-механических свойств горячепрессованных композиционных керамик системы Hf-Ti-Cr-Fe-V-N	90
Зуев Ю.В. Особенности коагуляции и дробления капель в газожидкостных турбулентных струях	103
Ким В.В., Брендаков В.Н. Моделирование трехмерного поля скорости в барабанной вращающейся печи	119
Крайнов А.Ю., Моисеева К.М. Исследование газодинамики горения смесового твердого топлива при колебаниях давления	130
Папин А.А., Токарева М.А. Разрешимость одномерной задачи движения жидкости в пороупругой среде с проницаемыми границами	140
Шляхиян Д.А., Юрин В.А., Ратманова О.В. Связанная неосесимметричная нестационарная задача термоупругости для длинного цилиндра	152

CONTENTS

MATHEMATICS

Zverev V.G. A special difference scheme for solving stiff boundary value problems of convective-diffusion transfer	5
Zubov N.E., Ryabchenko V.N. Method for preconditioning matrix equations based on zero divisors	18
Krylov P.A., Norbosambuev T.D. On automorphisms and derivations of reduced incidence algebras and coalgebras	33
Solomatina D.V. Direct products of cyclic semigroups with zero, admitting outerplanar and generalized outerplanar Cayley graphs	40

MECHANICS

Bel'kheeva R.K. Low-parametric equation of state for graphite describing solid and porous samples under shock and unloading waves	50
Borodin V.A., Bubenchikov M.A., Bubenchikov A.M., Mamontov D.V. Highly accurate representations of van der Waals interactions	64
Glagolev V.V., Lutkhov A.I. On the determination of specific elastic energy flow to the vertex of a physical cut via a finite element solution	78
Evseev N.S., Zhukov I.A., Mubarakov R., Bel'chikov I.A. A study of the physical and mechanical properties of hot-pressed composite ceramics of the Hf–Ti–Cr–Fe–V–N system	90
Zuev Yu.V. Features of the coagulation and fragmentation of drops in turbulent gas–liquid jets	103
Kim V.V., Brendakov V.N. Modeling of a three-dimensional velocity field in a rotary drum furnace	119
Krainov A.Yu., Moiseeva K.M. A study of the gas dynamics of combustion of a mixed solid propellant with pressure fluctuations	130
Papin A.A., Tokareva M.A. Solvability of a one-dimensional problem of fluid flow in poroelastic medium with permeable boundaries	140
Shlyakhin D.A., Yurin V.A., Ratmanova O.V. A coupled non-axisymmetric non-stationary problem of the thermoelasticity of a long cylinder	152

МАТЕМАТИКА

MATHEMATICS

Научная статья

УДК 519.6

doi: 10.17223/19988621/90/1

MSC: 65L04, 65L12

Специальная разностная схема для решения жестких краевых задач конвективно-диффузионного переноса**Валентин Георгиевич Зверев***Томский государственный университет, Томск, Россия, zverev@niipmm.tsu.ru*

Аннотация. Конвективно-диффузионное уравнение переноса лежит в основе описания широкого круга процессов в механике сплошных сред. Доминирование конвекции над диффузией, знакопеременность коэффициента при первой производной приводят к образованию локальных пограничных и внутренних переходных слоев с большими градиентами функции, что создает серьезные трудности при численном анализе задачи классическими разностными схемами. Традиционная аппроксимация первой производной центральными разностями при больших числах Пекле приводит к осцилляциям и нарушению монотонности численного решения. Чтобы избежать этого, требуется сильное уменьшение шага сетки в областях узких зон с большими градиентами. Использование односторонних разностей сильно размывает искомое решение из-за схемной вязкости и приводит к потере точности. Практические потребности решения жестких краевых задач требуют разработки и применения вычислительных технологий, обеспечивающих монотонность, точность и экономичность численного анализа. В данной работе предложена новая специальная разностная схема для численного решения жесткого конвективно-диффузионного уравнения переноса. Доминирующий конвективный член исключен из явного рассмотрения путем перехода к самосопряженной форме уравнения, что позволяет использовать известные методы численной аппроксимации. Для построения разностного аналога дифференциального уравнения на трехточечном шаблоне используется метод контрольного объема. Полученная схема является монотонной, консервативной. На тестовых примерах показаны большие возможности предложенной разностной схемы при больших числах Пекле на грубых сетках при решении жестких краевых задач конвективно-диффузионного переноса.

Ключевые слова: конвективно-диффузионный перенос, разностная схема, метод контрольного объема, трехточечный шаблон, монотонность решения

Благодарности: Исследование выполнено при поддержке проекта № 0721-2020-0032 государственного задания Минобрнауки России.

Для цитирования: Зверев В.Г. Специальная разностная схема для решения жестких краевых задач конвективно-диффузионного переноса // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2024. № 90. С. 5–17. doi: 10.17223/19988621/90/1

A SPECIAL DIFFERENCE SCHEME FOR SOLVING STIFF BOUNDARY VALUE PROBLEMS OF CONVECTIVE-DIFFUSION TRANSFER

Valentin G. Zverev

Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation, zverev@niipmm.tsu.ru

Abstract. The convective-diffusion transfer equation is often found in problems of hydro-mechanics and heat and mass transfer. The dominance of convection over diffusion and the change in sign of the coefficient at the first derivative lead to the formation of boundary and internal layers with high gradients of the function. This creates serious difficulties in numerical analysis of the problem using traditional difference schemes. The traditional method of approximating the first derivative using central differences at high Peclet numbers can lead to oscillations and violate the monotonicity of the numerical solution. To avoid this problem, it is necessary to significantly reduce the size of grid cells in narrow areas with large gradients of the unknown function. The use of one-sided differences significantly smears the desired solution, due to the viscosity of the scheme, and leads to loss of accuracy. The practical need to solve stiff boundary value problems requires the development and use of computational technologies that guarantee monotonicity, accuracy, and cost-effectiveness in numerical analysis. In this paper, a new special difference scheme is proposed for the numerical solution of a stiff equation of convective-diffusion transfer. The dominant convective term is eliminated from explicit consideration by transforming the equation into self-adjointed form, which permits the use of well-known numerical approximation techniques. The control volume method is used to construct a difference analogue of a differential equation on a three-point template. The resulting scheme is monotonic and conservative. The test examples show great possibilities of the proposed difference scheme for large Peclet numbers on coarse grids in solving stiff boundary value problems of convective diffusion transfer.

Keywords: convective-diffusion transfer, difference scheme, control volume method, three-point template, solution's monotonicity

Acknowledgments: This research was carried out with the support by state task (project No. 0721-2020-0032) of the Russian Ministry of Education and Science.

For citation: Zverev, V.G. (2024) A special difference scheme for solving stiff boundary value problems of convective-diffusion transfer. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 90. pp. 5–17. doi: 10.17223/19988621/90/1

Введение

Математическое описание широкого круга процессов теплообмена опирается на конвективно-диффузионное уравнение переноса. Основным способом его решения являются численные методы. Доминирование конвекции над диффузией, знакопеременность коэффициента при первой производной приводят

к образованию локальных областей с большими градиентами функции – пограничных и внутренних переходных слоев, что создаст серьезные трудности при решении краевой задачи классическими разностными схемами [1, 2]. Их причиной является различный масштаб процессов диффузии, конвекции, источников и стоков. Математически это приводит к возникновению в задаче малого параметра при старшей производной и порождает сингулярно возмущенную задачу.

Появление осцилляций и нарушение монотонности численного решения дифференциального уравнения переноса является одной из проблем, возникающей при аппроксимации первой производной уравнения центральными разностями.

Такая аппроксимация приводит к потере диагонального преобладания, несимметричности матрицы коэффициентов системы разностных уравнений и ухудшению ее свойств. Для обеспечения монотонности решения требуется сильное уменьшение шага сетки в области узких зон с большими градиентами решения – пограничных слоев, что ведет к большим затратам процессорного времени.

Используемый на практике переход к односторонним разностям сильно размывает узкие зоны искомого решения из-за схемной вязкости и в конечном счете приводит к потере точности. При больших числах Пекле она вообще превышает физическую вязкость (коэффициент при второй производной) исходного уравнения.

Способу аппроксимации конвективного слагаемого в уравнении переноса в литературе уделяется большое внимание. В [3] для этой цели применяются локальные весовые интерполяционные кубические сплайны, что дает определенные преимущества перед широко используемыми монотонизированными аппроксимациями второго или третьего порядка. Метод сопряженных операторов предложен в [4] для построения разностных схем, являющихся точным дискретным аналогом исходной краевой задачи для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка.

В современных вычислительных технологиях для обеспечения монотонности решения применяют принцип регуляризации разностных схем [1]. Обзор исследований по проблеме численного решения сингулярно возмущенных краевых задач на основе применения сеточных методов и разностных схем высокого порядка имеется в [5–9] и не является целью данной работы.

Практические потребности решения жестких краевых задач конвективно-диффузионного переноса, возникающих перед исследователями, ставят задачу разработки и применения вычислительных технологий, обеспечивающих монотонность, точность и экономичность численного анализа [9].

В данной работе получена новая разностная схема для решения стационарного конвективно-диффузионного уравнения переноса. В основе ее построения лежат исключение на математическом уровне слагаемого с первой производной и применение метода контрольного объема [2] к дивергентной форме уравнения для получения разностного аналога дифференциального уравнения на трехточечном шаблоне.

Математическая постановка задачи

Рассмотрим одномерное стационарное конвективно-диффузионное уравнение переноса на отрезке $[a, b]$ с крайвыми условиями первого рода [6]

$$\frac{d}{dx} \left(f_1(x) \frac{du}{dx} \right) + f_2(x) \frac{du}{dx} + f_3(x)u = f_4(x), \quad (1)$$

$$x = a: \quad u = u_0, \quad (2)$$

$$x = b: \quad u = u_N.$$

Здесь $u(x)$ – искомая функция; $f_1(x)$ – $f_4(x)$ – коэффициенты уравнения. Считаем, что выполняются обычные для корректной постановки задачи условия $f_1(x) \geq \varepsilon > 0$ и $f_3(x) \leq 0$, причем значение ε может быть сколь угодно малым. Из выражения (1) путем варьирования коэффициентов $f_1(x)$ – $f_4(x)$ можно получить необходимую форму дифференциального уравнения. Выбор граничных условий первого рода не является принципиальным и принят лишь для упрощения изложения основных этапов построения разностной схемы на трехточечном шаблоне.

Методика построения разностной схемы

Введем на отрезке $[a, b]$ произвольную неравномерную сетку

$$\Omega = \{ a = x_0 < \dots < x_{i-1} < x_i < x_{i+1} < \dots < x_N = b \},$$

$$i = 0 \dots N, \quad h_{i+1} = x_{i+1} - x_i, \quad h_i = x_i - x_{i-1}.$$

Из теории обыкновенных дифференциальных уравнений следует [10], что слагаемое с первой производной может быть исключено из явного рассмотрения. Используем для этой цели функцию $\varphi(x)$, в результате получим преобразованный вид, эквивалентный исходному уравнению (1) [10, 11]:

$$\frac{1}{\varphi(x)} \frac{d}{dx} \left(\varphi(x) f_1(x) \frac{du}{dx} \right) + f_3(x)u = f_4(x), \quad \varphi(x) = \exp \left(\int_{x_i}^x \frac{f_2(x)}{f_1(x)} dx \right), \quad (3)$$

где x_i – произвольная точка (узел) по координате x . Убедиться в правильности (3) можно путем непосредственной проверки.

Умножим все слагаемые (3) на $\varphi(x) > 0$, получим самосопряженную (дивергентную) форму уравнения (1):

$$\frac{d}{dx} \left(\varphi(x) f_1(x) \frac{du}{dx} \right) + \varphi(x) f_3(x)u = \varphi(x) f_4(x). \quad (4)$$

Нетрудно видеть, что теперь в (4) при коэффициенте диффузии появился множитель с сильно меняющейся функцией $\varphi(x)$, описывающей взаимодействие второй и первой производных. Формат уравнения (4) уже не содержит в явном виде исходной трудности и позволяет использовать известные методы численной аппроксимации.

Для получения разностного аналога дифференциального уравнения проинтегрируем (4) от $x_{i-1/2}$ до $x_{i+1/2}$, где индексы $i - 1/2$ и $i + 1/2$ соответствуют серединам отрезков $[x_{i-1}, x_i]$ и $[x_i, x_{i+1}]$ соответственно, получим

$$J_{i+1/2} - J_{i-1/2} + \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \varphi(x) f_3(x) u dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \varphi(x) f_4(x) dx, \quad J = \varphi(x) f_1(x) \frac{du}{dx}. \quad (5)$$

Балансовое выражение (5) является основой для получения различного вида разностных схем в зависимости от предположения о характере поведения коэффициентов $f_3(x)$, $f_4(x)$ уравнения. Рассмотрим некоторых из них.

Аппроксимируем функции $J(x)$ и $\varphi(x)$ в промежуточных узлах следующим образом:

$$J_{i+1/2} \approx \varphi_{i+1/2} f_{1,i+1/2} \frac{u_{i+1} - u_i}{h_{i+1}}, \quad J_{i-1/2} \approx \varphi_{i-1/2} f_{1,i-1/2} \frac{u_i - u_{i-1}}{h_i}, \quad (6)$$

$$\varphi_{i+1/2} = \exp \left\{ \int_{x_i}^{x_{i+1/2}} \frac{f_2(x)}{f_1(x)} dx \right\} \approx \exp \left\{ \frac{f_{2,i+1/2} h_{i+1}}{f_{1,i+1/2} 2} \right\} = \exp(z^+), \quad z^+ = \frac{f_{2,i+1/2} h_{i+1}}{f_{1,i+1/2} 2},$$

$$\varphi_{i-1/2} = \exp \left\{ \int_{x_i}^{x_{i-1/2}} \frac{f_2(x)}{f_1(x)} dx \right\} \approx \exp \left\{ -\frac{f_{2,i-1/2} h_i}{f_{1,i-1/2} 2} \right\} = \exp(-z^-), \quad z^- = \frac{f_{2,i-1/2} h_i}{f_{1,i-1/2} 2},$$

$$f_{1,i+1/2} = \frac{f_{1,i} + f_{1,i+1}}{2}, \quad f_{2,i+1/2} = \frac{f_{2,i} + f_{2,i+1}}{2}.$$

Здесь z – сеточный параметр, имеющий смысл числа Пекле. Верхние индексы «+» и «-» относятся к интервалам справа и слева от узла i соответственно. Значения коэффициентов $f_{1,i-1/2}$ и $f_{2,i-1/2}$ определяются аналогично по формуле среднего арифметического от значений на концах сеточного отрезка. В случае сильно меняющегося коэффициента $f_1(x)$ согласно [2] целесообразно использовать формулу среднего гармонического.

Рассмотрим наиболее простой случай, когда $f_3(x) = f_{3,i}$ и $f_4(x) = f_{4,i}$ – кусочно-постоянные на сеточном отрезке $x_{i-1/2} \leq x \leq x_{i+1/2}$, взятые в i -м узле. Значение неизвестной u также возьмем в i -м узле для усиления его влияния в дискретном аналоге. В итоге остается интеграл от «быстрой» функции $\varphi(x)$, который может быть взят точно. С учетом введенных обозначений (6) получим

$$\begin{aligned} \psi_i &= \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \varphi(x) dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_i} \varphi(x) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1/2}} \varphi(x) dx \approx \\ &\approx \frac{h_i}{2} \left[\frac{1 - \exp(-z^-)}{z^-} \right] + \frac{h_{i+1}}{2} \left[\frac{\exp(z^+) - 1}{z^+} \right] = \frac{h_i}{2} \psi^- + \frac{h_{i+1}}{2} \psi^+, \\ \psi^-(z^-) &= \frac{1 - \exp(-z^-)}{z^-}, \quad \psi^+(z^+) = \frac{\exp(z^+) - 1}{z^+}, \end{aligned} \quad (7)$$

где ψ^- , ψ^+ – сеточные функции аргумента z . Выражения для интегралов с источниками с учетом (7) имеют вид:

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \varphi(x) f_3(x) u dx &= \int_{x_{i-1/2}}^{x_i} \varphi(x) f_3(x) u dx + \int_{x_i}^{x_{i+1/2}} \varphi(x) f_3(x) u dx \approx \\ &\approx u_i f_{3,i} \left[\frac{h_i}{2} \psi^- + \frac{h_{i+1}}{2} \psi^+ \right] = u_i f_{3,i} \psi_i, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \varphi(x) f_4(x) dx = \int_{x_{i-1/2}}^{x_i} \varphi(x) f_4(x) dx + \int_{x_i}^{x_{i+1/2}} \varphi(x) f_4(x) dx \approx f_{4,i} \left[\frac{h_i}{2} \psi^- + \frac{h_{i+1}}{2} \psi^+ \right] = f_{4,i} \psi_i.$$

В итоге, подставляя (6), (8) в (5), получим коэффициенты канонического вида разностной схемы во внутренних узлах, которые зависят от сеточных функций $\varphi(z)$, $\psi(z)$:

$$a_i u_{i-1} - c_i u_i + b_i u_{i+1} = -d_i, \quad i = \overline{1, N-1}, \quad (9)$$

$$a_i = \varphi_{i-1/2} \frac{f_{1,i-1/2}}{h_i}, \quad b_i = \varphi_{i+1/2} \frac{f_{1,i+1/2}}{h_{i+1}}, \quad c_i = a_i + b_i - f_{3,i} \Psi_i, \quad d_i = -f_{4,i} \Psi_i.$$

Представляет интерес другой важный случай, когда $f_3(x)$ и $f_4(x)$ – кусочно-линейные функции на сеточных отрезках $[x_{i-1}, x_i]$ и $[x_i, x_{i+1}]$, например

$$f_3(x) = f_{3,i} + \frac{(f_{3,i+1} - f_{3,i})}{h_{i+1}}(x - x_i), \quad f_4(x) = f_{4,i} + \frac{(f_{4,i+1} - f_{4,i})}{h_{i+1}}(x - x_i).$$

Тогда интеграл от источника $f_4(x)$ принимает вид:

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \varphi(x) f_4(x) dx &= \int_{x_{i-1/2}}^{x_i} \varphi(x) \left[f_{4,i} + \frac{(f_{4,i} - f_{4,i-1})}{h_i}(x - x_i) \right] dx + \\ &+ \varphi \int_{x_i}^{x_{i+1/2}} \varphi(x) \left[f_{4,i} + \frac{(f_{4,i+1} - f_{4,i})}{h_{i+1}}(x - x_i) \right] dx \approx \\ &\approx f_{4,i-1} \frac{h_i}{2} \xi^-(z^-) + f_{4,i} \left[\frac{h_i}{2} \eta^-(z^-) + \frac{h_{i+1}}{2} \eta^+(z^+) \right] + f_{4,i+1} \frac{h_{i+1}}{2} \xi^+(z^+), \quad (10) \\ \xi^-(z^-) &= \frac{1}{2} \frac{[1 - \exp(-z^-)(z^- + 1)]}{(z^-)^2}, \quad \xi^+(z^+) = \frac{1}{2} \frac{[\exp(z^+)(z^+ - 1) + 1]}{(z^+)^2}, \\ \eta^-(z^-) &= \psi^-(z^-) - \xi^-(z^-), \quad \eta^+(z^+) = \psi^+(z^+) - \xi^+(z^+). \end{aligned}$$

Здесь $\xi(z)$, $\eta(z)$ – сеточные функции источника, играющие роль весовых множителей при периферийном и центральном узлах шаблона. Интеграл от линейного источника $f_3(x)$ аналогичен (10):

$$\begin{aligned} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \varphi(x) f_3(x) u dx &\approx \\ &\approx u_i \left\{ f_{3,i-1} \frac{h_i}{2} \xi^-(z^-) + f_{3,i} \left[\frac{h_i}{2} \eta^-(z^-) + \frac{h_{i+1}}{2} \eta^+(z^+) \right] + f_{3,i+1} \frac{h_{i+1}}{2} \xi^+(z^+) \right\}. \quad (11) \end{aligned}$$

Подставляя (10), (11) в (5), с учетом (2), (6) получим вид специальной разностной схемы во внутренних узлах:

$$a_i u_{i-1} - c_i u_i + b_i u_{i+1} = -d_i, \quad i = \overline{1, N-1}, \quad (12)$$

$$a_i = \varphi_{i-1/2} \frac{f_{1,i-1/2}}{h_i}, \quad b_i = \varphi_{i+1/2} \frac{f_{1,i+1/2}}{h_{i+1}},$$

$$\begin{aligned} c_i &= a_i + b_i - \left\{ f_{3,i-1} \frac{h_i}{2} \xi^-(z^-) + f_{3,i} \left[\frac{h_i}{2} \eta^-(z^-) + \frac{h_{i+1}}{2} \eta^+(z^+) \right] + f_{3,i+1} \frac{h_{i+1}}{2} \xi^+(z^+) \right\}, \\ d_i &= - \left\{ f_{4,i-1} \frac{h_i}{2} \xi^-(z^-) + f_{4,i} \left[\frac{h_i}{2} \eta^-(z^-) + \frac{h_{i+1}}{2} \eta^+(z^+) \right] + f_{4,i+1} \frac{h_{i+1}}{2} \xi^+(z^+) \right\}. \end{aligned}$$

Трехточечные выражения (12) образуют систему $(N - 1)$ линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей с неизвестными $u_1, \dots, u_{N-1}$. Она решается прямым экономичным методом прогонки [12], требующим $O(N)$ арифметических действий.

Отметим некоторые важные свойства специальной разностной схемы конвективно-диффузионного переноса. Согласно (12), коэффициенты a_i , b_i , c_i являются всегда положительными, так как сеточная функция $\varphi(z) > 0$ для любых z . Кроме того, в матрице коэффициентов имеет место диагональное преобладание $c_i \geq a_i + b_i$, $i = \overline{1, N-1}$, что обеспечивает устойчивость метода прогонки и монотонность разностной схемы [9]. Также она обладает консервативностью и обеспечивает интегральный закон сохранения, справедливый для дифференциального уравнения (1).

Посредством коэффициентов a_i , b_i , c_i учитывается решение однородной части уравнения (1). Основу их выражений составляет сеточная функция $\varphi(z)$, описывающая взаимодействие конвекции и диффузии. Коэффициент d_i определяет неоднородную часть уравнения. Нетрудно видеть, что источник $f_4(x)$ при линейной зависимости от координаты x берется во всех узлах шаблона. Через сеточные функции $\xi(z)$, $\eta(z)$ осуществляется влияние решения однородной части уравнения на источник.

Асимптотика коэффициентов разностной схемы

Представляют интерес асимптотические выражения коэффициентов специальной схемы (9), (12) при малых значениях сеточного параметра $z \rightarrow 0$, когда становится справедливым применение традиционных разностных схем. Разложение сеточных функций в ряд Тейлора в этом случае имеет вид:

$$\begin{aligned} \varphi_{i-1/2} &= \exp(-z^-) = 1 - z^- + O((z^-)^2), \quad \varphi_{i+1/2} = \exp(z^+) = 1 + z^+ + O((z^+)^2), \quad (13) \\ \psi^- &= \frac{1 - \exp(-z^-)}{z^-} = 1 - \frac{z^-}{2} + O((z^-)^2), \quad \psi^+ = \frac{\exp(z^+) - 1}{z^+} = 1 + \frac{z^+}{2} + O((z^+)^2), \\ \xi^- &= \frac{1}{2} \frac{[1 - \exp(-z^-)(z^- + 1)]}{(z^-)^2} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} - \frac{z^-}{3} \right] + O((z^-)^2), \\ \xi^+(z^+) &= \frac{1}{2} \frac{[\exp(z^+)(z^+ - 1) + 1]}{(z^+)^2} = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{2} + \frac{z^+}{3} \right] + O((z^+)^2), \\ \eta^-(z^-) &= \psi^-(z^-) - \xi^-(z^-) = \left[\frac{3}{4} - \frac{z^-}{3} \right] + O((z^-)^2), \\ \eta^+(z^+) &= \psi^+(z^+) - \xi^+(z^+) = \left[\frac{3}{4} + \frac{z^+}{3} \right] + O((z^+)^2). \end{aligned}$$

Учитывая (13), видим, что в предельном случае коэффициенты упрощенной схемы (9) стремятся к выражениям

$$\begin{aligned} a_i u_{i-1} - c_i u_i + b_i u_{i+1} &= -d_i, \quad i = \overline{1, N-1}, \quad (14) \\ a_i &= \frac{f_{1,i-1/2}}{h_i} - \frac{f_{2,i-1/2}}{2}, \quad b_i = \frac{f_{1,i+1/2}}{h_{i+1}} + \frac{f_{2,i+1/2}}{2}, \\ c_i &= a_i + b_i - f_{3,i} \left[\frac{h_i}{2} + \frac{h_{i+1}}{2} \right], \quad d_i = -f_{4,i} \left[\frac{h_i}{2} + \frac{h_{i+1}}{2} \right]. \end{aligned}$$

Нетрудно видеть, что (14) представляет собой традиционную схему с центральными разностями для решения конвективно-диффузионного уравнения, записанную на неравномерной сетке.

Для схемы (12) в предельном случае имеем

$$\begin{aligned} a_i u_{i-1} - c_i u_i + b_i u_{i+1} &= -d_i, & i = \overline{1, N-1}, \\ a_i &= \frac{f_{1,i-1/2}}{h_i} - \frac{f_{2,i-1/2}}{2}, & b_i = \frac{f_{1,i+1/2}}{h_{i+1}} + \frac{f_{2,i+1/2}}{2}, \\ c_i &= a_i + b_i - \left\{ \frac{h_i}{2} \frac{f_{3,i-1}}{4} + \frac{3f_{3,i}}{4} \left[\frac{h_i}{2} + \frac{h_{i+1}}{2} \right] + \frac{h_{i+1}}{2} \frac{f_{3,i+1}}{4} \right\}, \\ d_i &= - \left\{ \frac{h_i}{2} \frac{f_{4,i-1}}{4} + \frac{3f_{4,i}}{4} \left[\frac{h_i}{2} + \frac{h_{i+1}}{2} \right] + \frac{h_{i+1}}{2} \frac{f_{4,i+1}}{4} \right\}. \end{aligned} \quad (15)$$

Как видно, здесь также присутствует аппроксимация первой производной центральными разностями, однако выражения для источников имеют более сложный вид, характерный для схем сплайновой аппроксимации [13].

Результаты расчетов и их анализ

Для анализа точности предложенной схемы (12) и сравнения с другими разностными аппроксимациями было рассмотрено несколько тестовых задач. Одна из них приведена в [11]:

$$\begin{aligned} \frac{du}{dx} - \frac{1}{\text{Re}} \frac{d^2 u}{dx^2} &= \sin \pi x, & x \in (0, 1), \\ u(0) &= u(1) = 0, \end{aligned} \quad (16)$$

и имеет аналитическое решение

$$u(x) = \frac{\text{Re}}{\pi^2 + \text{Re}^2} \sin(\pi x) + \frac{\text{Re}^2}{\pi(\pi^2 + \text{Re}^2)} \left\{ 1 - \cos(\pi x) - 2 \frac{(e^{-\text{Re}(1-x)} - e^{-\text{Re}})}{(1 - e^{-\text{Re}})} \right\},$$

которое показано сплошной кривой 1 на рис. 1. Увеличение числа Re при старшей производной приводит к возникновению области резкого изменения функции – пограничного слоя (ПС) на правом конце расчетной области.

В табл. 1 и на рис. 1 приведены результаты численного решения задачи на равномерной грубой сетке с шагом $h = 1/11$ ($x_0 = 0$, $x_{11} = 1$) при числах $\text{Re} = 10^2$ и $\text{Re} = 10^3$, что соответствует сеточным значениям $\text{Re}_h = 9.1$ и $\text{Re}_h = 91$ соответственно. В обоих случаях ПС является подсеточным масштабом, и в его область не попадает ни одного расчетного узла.

В табл. 1 приняты следующие обозначения: u , u_h – точное и приближенное решения, $\Delta_h = u_h - u$ – погрешность численного решения. Строки a , b относятся к аппроксимации конвективного слагаемого односторонними и центральными разностями, v – к схеме Н.И. Булеева, Г.И. Тимухина [14] (совпадает со схемой А.М. Ильина [15]), z – к схеме (12) данной работы. Результаты численного решения указаны значками на рис. 1.

Из рис. 1 видно, что односторонние разности a плохо обрабатывают область погранслоного изменения функции на правом конце, схема b с центральными разностями, как и следует теоретически, приводит к сильным осцилляциям

решения. Ситуация с традиционной схемой становится еще более драматичной с увеличением числа Re .

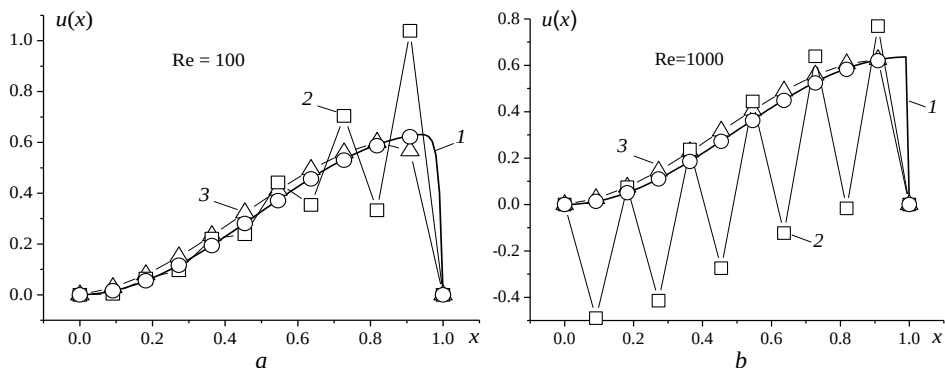


Рис. 1. Численное решение задачи (16) при различных значениях числа Re : 10^2 (a), 10^3 (b):
1 – точное решение, 2 – центральные, 3 – противопотоковые разности,
○ – специальная схема (12), $h = 1/11$

Fig. 1. Numerical solution of problem (16) for different values of the Re number:
 $Re =$ (a) 10^2 and (b) 10^3 . (1) exact solution, (2) central, (3) upwind differences,
○ is the special scheme (12), $h = 1/11$

Таблица 1

Результаты численного решения задачи (16) различными схемами на грубой сетке

Номер узла i		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
$Re = 10^2$	$u \cdot 10^4$	157	559	1 173	1 950	2 826	3 731	4 592	5 338	5 909	6 259
	a	125	235	322	380	402	388	338	251	90	-590
	$\bar{b}$	-117	76	-209	260	-444	689	1 053	1 700	-2 582	4 132
	$\bar{c}$	99	189	262	312	335	330	296	237	158	64
	ε	-1	-3	-6	-11	-16	-21	-27	-31	-35	-37
$Re = 10^3$	$u \cdot 10^4$	132	511	1 106	1 870	2 740	3 646	4 514	5 275	5 866	6 240
	a	127	242	335	399	429	421	378	303	200	11
	$\bar{b}$	5 030	233	-5 253	499	5 489	794	5 747	1 111	-6 037	1 446
	$\bar{c}$	-1	-3	-7	-13	-19	-25	-31	-36	-40	-42
	ε	-1	-3	-7	-13	-19	-25	-31	-36	-40	-42

Ошибка предложенной схемы (строка ε табл. 1) оказывается почти на порядок ниже одной из лучших специальных аппроксимаций $\bar{c}$ [11, 12] и по уровню погрешности соответствует результатам [6, 13, 14]. Улучшение точности численного решения напрямую связано с учетом линейной зависимости источника на сеточном интервале. Предложенная схема правильно воспроизводит решение при любом значении Re .

Практический интерес представляет случай переменных коэффициентов дифференциального уравнения конвективно-диффузионного переноса. Для его анализа была рассмотрена следующая задача [5, 9, 16, 17]:

$$\varepsilon u'' + (1 + x^2)u' - ((x - 0.5)^2 + 2)u + 4(3x^2 - 3x + 1)((x - 0.5)^2 + 2) = 0, \quad (17)$$

$$u(0) = -1, \quad u(1) = 0.$$

На рис. 2 (сплошная кривая) хорошо видно, что решение уравнения (17) содержит пограничный слой толщиной $\sim \varepsilon$ на левой границе. Несмотря на то, что шаг грубой сетки превышает его толщину $\sim \varepsilon = 1/512$, разностная схема (12) практически точно воспроизводит в узлах решение как при $h = 1/16$, так и при $h = 1/4$.

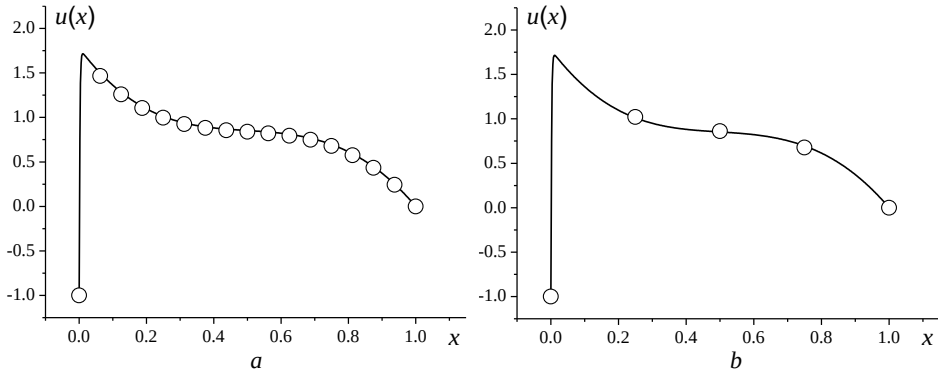


Рис. 2. Расчет функции $u(x)$ в задаче (17) при различном шаге сетки: $h = 1/16$ (a), $h = 1/4$ (b): сплошная линия – точное решение, $\circ$ – специальная схема (12), $\varepsilon = 1/512$

Fig. 2. Calculation of the function $u(x)$ in problem (17) at a different grid step: $h = (a)$ $1/16$ and (b) $1/4$. The solid line is the exact solution, $\circ$ is the special scheme (12), $\varepsilon = 0.01$

В общем случае коэффициент $f_2(x)$ при конвективном слагаемом в уравнении (1) может менять знак. Знакопеременность $f_2(x)$ делает возможным появление внутри расчетной области локальных областей с большими градиентами искомой функции в виде внутренних переходных слоев. Поэтому представляет практический интерес анализ возможностей предложенной специальной разностной схемы (12) конвективно-диффузионного переноса и в этом случае. Рассмотрим модельную задачу [5], содержащую точку поворота, в которой происходит смена знака коэффициента при первой производной, и в ней $f_2(x) = 0$ [9, 16, 17]:

$$\begin{aligned} \varepsilon u'' + 2xu' &= 0, \quad x \in (-1, 1), \\ u(-1) &= -1, \quad u(1) = 2. \end{aligned} \quad (18)$$

Задача имеет точное решение

$$u(x) = \frac{\Phi(1/\sqrt{\varepsilon}) + 3\Phi(x/\sqrt{\varepsilon})}{2\Phi(1/\sqrt{\varepsilon})}, \quad \Phi(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt. \quad (19)$$

Внутренний пограничный слой находится в окрестности точки поворота при $x = 0$ и имеет толщину $\sim \sqrt{\varepsilon}$. Здесь решение резко изменяется от -1 до 2 . Считаем, что точка поворота находится в одном из узлов сетки. Результаты расчетов показали, что схема (12) дает правильные значения $u(x)$ в узлах даже на грубой равномерной сетке при малом количестве узлов N . На рис. 3 в качестве примера приведены значения $u(x)$ при числе узлов $N = 20$ ($h = 0.1$) и $N = 4$ ($h = 0.5$). Малый параметр при старшей производной равняется $\varepsilon = 0.01$. Видно, что хорошо вычисляется функция внутри каждого из пограничных слоев, а также во внешней области. Увеличение числа узлов сетки N приводит к уменьшению различия численного и точного решений.

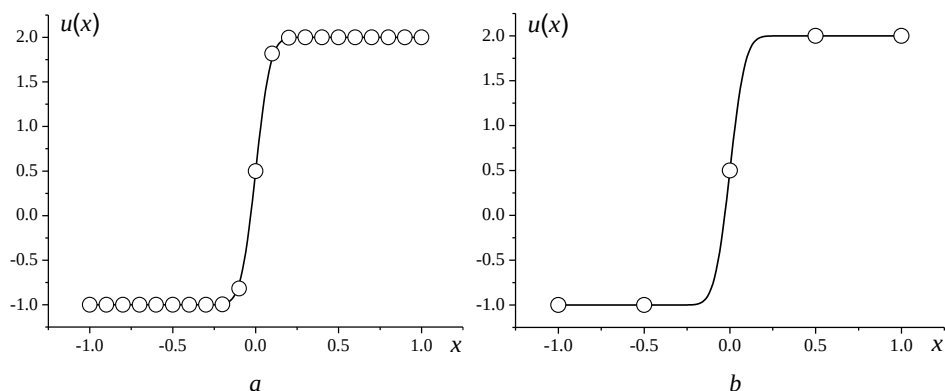


Рис. 3. Расчет функции $u(x)$ в задаче (18) с внутренней точкой поворота при различном шаге сетки: $h = 0.1$ (a), $h = 0.5$ (b): сплошная линия – точное решение, $\circ$ – специальная схема (12), $\varepsilon = 0.01$

Fig. 3. Calculation of the function $u(x)$ in problem (18) with an internal pivot point at a different grid step: $h = (a)$ 0.1 and (b) 0.5. A solid line is an exact solution, $\circ$ is the special scheme (12), $\varepsilon = 0.01$

Таким образом, приведенные результаты тестовых расчетов подтверждают изложенный теоретический анализ и показывают большие возможности предложенной специальной разностной схемы при решении жестких краевых задач по сравнению с традиционными аналогами, использующими центральные и односторонние разности при аппроксимации первой производной уравнения.

Заключение

Предложена новая специальная разностная схема решения жестких краевых задач конвективно-диффузионного переноса для граничных условий первого рода. Исследована асимптотика ее коэффициентов при малом значении сеточного параметра и получена связь с известными в литературе разностными аппроксимациями. Схема является монотонной, консервативной, обеспечивает устойчивое получение численного решения при больших числах Пекле на грубых сетках и имеет хорошие перспективы дальнейшего развития.

Литература

1. Самарский А.А., Вабичевич П.Н. Численные методы решения задач конвекции-диффузии. М.: Эдиториал УРСС, 1999.
2. Патанкар С. Численные методы решения задач тепломассообмена и динамики жидкости. М.: Энергоатомиздат, 1984.
3. Семёнова А.А., Старченко А.В. Разностная схема для нестационарного уравнения переноса, построенная с использованием локальных весовых интерполяционных кубических сплайнов // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2017. № 49. С. 61–74. doi: 10.17223/19988621/49/6
4. Воеводин А.Ф. Метод сопряженных операторов для решения краевых задач для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка // Сибирский журнал вычислительной математики. 2012. Т. 15, № 3. С. 250–260.

5. Дулан Э., Миллер Дж., Шилдерс У. Равномерные численные методы решения задач с пограничным слоем. М. : Мир, 1983.
6. Багаев Б.М., Карепова Е.Д., Шайдуров В.В. Сеточные методы решения задач с пограничным слоем. Новосибирск : Наука, 2001. Ч. 2. 224 с.
7. Задорин А.И. Разностные схемы для задач с пограничным слоем. Омск : ОмГУ, 2002. 118 с.
8. Liseikin V.D., Karasuljić S., Paasonen V.I. Numerical Grids and High-Order Schemes for Problems with Boundary and Interior Layers. Novosibirsk : IPC Novosibirsk State University, 2021.
9. Зверев В.Г. Численные методы решения задач с пограничным слоем. Новосибирск : Наука, 2017.
10. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. М. : Наука, 1976.
11. Булеев Н.И. Пространственная модель турбулентного обмена. М. : Наука, 1989.
12. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М. : Наука, 1978.
13. Гришин А.М., Берцун В.Н., Зинченко В.И. Итерационно-интерполяционный метод и его приложения. Томск : Изд-во Том. ун-та, 1981.
14. Булеев Н.И., Тимухин Г.И. О численном решении уравнений гидродинамики для плоского потока вязкой несжимаемой жидкости // Известия СО АН СССР. Сер. техн. наук. 1969. Вып. 1, № 3. С. 14–24.
15. Ильин А.М. Разностная схема для дифференциального уравнения с малым параметром при старшей производной // Математические заметки. 1969. Т. 6, вып. 2. С. 237–248.
16. Зверев В.Г., Гольдин В.Д. Разностная схема для решения конвективно-диффузионных задач тепломассообмена // Вычислительные технологии. 2002. Т. 7, № 6. С. 24–37.
17. Зверев В.Г. Об одной специальной разностной схеме для решения краевых задач тепломассообмена // Журнал вычислительной математики и математической физики. 2003. Т. 43, № 2. С. 265–278.

References

1. Samarskiy A.A., Vabishevich P.N. (1999) *Chislennyye metody resheniya zadach konveksii-diffuzii* [Numerical methods for solving convection-diffusion problems]. Moscow: URSS.
2. Patankar S. (1980) *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. New York: Hemisphere.
3. Semenova A.A., Starchenko A.V. (2017) Raznostnaya skhema dlya nestatsionarnogo uravneniya perenosa, postroyennaya s ispol'zovaniyem lokal'nykh vesovykh interpolatsionnykh kubicheskikh splaynov [The finite-difference scheme for the unsteady convection-diffusion equation based on weighted local cubic spline interpolation]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 49. pp. 61–74. DOI: 10.17223/19988621/49/6.
4. Voevodin A.F. (2012) A method of adjoint operators for solving boundary value problems for second-order ordinary different equations. *Numerical Analysis and Applications*. 5(3). pp. 204–212. DOI: 10.1134/S1995423912030020.
5. Doolan E., Miller J., Shilders W. (1980) *Uniform Numerical Methods for Problems with Initial and Boundary Layers*. Dublin: Boole Press.
6. Bagaev B.M., Karepova E.D., Shaidurov V.V. (2001) *Setochnyye metody resheniya zadach s pogranichnym sloyem* [Grid methods for solving problems with a boundary layer]. Part 2. Novosibirsk: Nauka.
7. Zadorin A.I. (2002) *Raznostnyye skhemy dlya zadach s pogranichnym sloyem* [Difference schemes for boundary layer problems]. Omsk: Omsk State University.
8. Liseikin V.D., Karasuljić S., Paasonen V.I. (2021) *Numerical Grids and High-Order Schemes for Problems with Boundary and Interior Layers*. Novosibirsk: IPC Novosibirsk State University.

9. Zverev V.G. (2017) *Chislennyye metody resheniya zadach s pograničnym slojem* [Numerical methods for solving problems with a boundary layer]. Novosibirsk: Nauka.
10. Kamke E. (1976) *Spravochnik po obyknovennym differentsial'nyh uravneniyam* [Handbook of ordinary differential equations]. Moscow: Nauka.
11. Buleev N.I. (1989) *Prostranstvennaya model' turbulentnogo obmena* [Spatial model of turbulent exchange]. Moscow: Nauka.
12. Samarskiy A.A., Nikolaev E.S. (1978) *Metody resheniya setochnykh uravneniy* [Methods for solving grid equations]. Moscow: Nauka.
13. Grishin A.M., Bertsun V.N., Zinchenko V.I. (1981) *Iteratsionno-interpolyatsionnyy metod i yego prilozheniya* [Iterative-interpolation method and its applications]. Tomsk: Tomsk State University.
14. Buleev N.I., Timukhin G.I. (1969) O chislennom reshenii uravneniy gidrodinamiki dlya ploskogo potoka vyazkoy neszhimayemoy zhidkosti [On the numerical solution of the equations of hydrodynamics for a plane flow of a viscous incompressible fluid]. *Izvestiya SO AN SSSR, Series of Technical Sciences*. 1(3). pp. 14–24.
15. Il'in A.M. (1969) Differencing scheme for a differential equation with a small parameter affecting the highest derivative. *Mathematical Notes*. 6(2). pp. 596–602.
16. Zverev V.G., Gol'din V.D. (2002) Raznostnaya skhema dlya resheniya konvektivno-diffuzionnykh zadach teplomassoobmena [Finite-difference scheme for solving convection-diffusion problems of heat-mass exchange]. *Vychislitel'nyye tekhnologii*. 7(6). pp. 24–37.
17. Zverev V.G. (2003) A special difference scheme for boundary value problems in heat and mass transfer // *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 43(2), pp. 255–267.

Сведения об авторе:

Зверев Валентин Георгиевич – кандидат физико-математических наук, заведующий лабораторией Научно-исследовательского института прикладной математики и механики Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: zverev@niipmm.tsu.ru

Information about the author:

Zverev Valentin G. (Candidate of Physics and Mathematics, Head of laboratory, Research Institute of Applied Mathematics and Mechanics of Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: zverev@niipmm.tsu.ru

The article was submitted 22.12.2023; accepted for publication 05.08.2024

Статья поступила в редакцию 22.12.2023; принята к публикации 05.08.2024

Научная статья

УДК 519.6

doi: 10.17223/19988621/90/2

MSC: 15-XX

Метод переобусловливания матричных уравнений на основе делителей нуля

Николай Евгеньевич Зубов¹, Владимир Николаевич Рябченко²

^{1,2} ПАО РКК «Энергия» им. С.П. Королёва, Королёв, Россия

^{1,2} МГТУ им. Н.Э. Баумана, Москва, Россия

¹ nik.zubov@gmail.com

² ryabchenko.vn@yandex.ru

Аннотация. Обсуждается метод переобусловливания алгебраических матричных уравнений без преобразования матрицы правой части. В основе метода лежит техника матричных делителей нуля. Данный метод позволяет определять такие матрицы переобусловливания, которые наряду с изменением числа обусловленности матрицы коэффициентов левой части оставляют неизменной матрицу коэффициентов правой части, что неизбежно приводит к изменению степени обусловленности уравнения. Преимущества предложенного метода продемонстрированы на числовых примерах. Рассуждения, приведенные в статье относительно левостороннего матричного уравнения (матрица коэффициентов находится слева относительно неизвестной матрицы), также справедливы для правостороннего и двустороннего уравнений.

Ключевые слова: алгебраические матричные уравнения, точность решения уравнений, переобусловливание матричных уравнений, делители нуля

Для цитирования: Зубов Н.Е., Рябченко В.Н. Метод переобусловливания матричных уравнений на основе делителей нуля // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2024. № 90. С. 18–32. doi: 10.17223/19988621/90/2

Original article

Method for preconditioning matrix equations based on zero divisors

Nikolay E. Zubov¹, Vladimir N. Ryabchenko²

^{1,2} S.P. Korolev Rocket and Space Public Corporation Energia, Korolev, Russian Federation

^{1,2} Bauman Moscow State Technical University (BMSTU), Moscow, Russian Federation

¹ nik.zubov@gmail.com

² ryabchenko.vn@yandex.ru

Abstract. The article discusses the method of preconditioning of algebraic matrix equations without transforming the matrix of the right-hand side. The method is based on the

technique of matrix zero divisors. The presence of the right (left) zero divisor is associated with linear dependence of the columns (rows) of the matrix. In this case, the problem of determining such preconditioning matrices is posed and solved, which, along with a decrease in the condition number of the matrix of coefficients on the left side, leave the matrix of coefficients on the right-hand side unchanged. The transformations consist solely in the rotation of the system around its exact, although still unknown, solution. This makes it possible to further improve the accuracy of determining the solution by eliminating possible computational errors in the transformation of the right-hand side of the matrix equation. It is shown that the choice of preconditioners, which make it possible to reduce the degree of conditionality of the equation, can be made on the basis of the method of simple iteration or taking into account the lower estimate of the condition number of the matrix on the left-hand side by fixing its eigenvalues using well-known and well-developed methods. The advantages of the proposed method are demonstrated by numerical examples. The reasoning given in the article regarding the left-handed matrix equation (the matrix of coefficients is on the left of the unknown matrix) is also valid for the right-handed and two-sided equations.

Keywords: algebraic matrix equations, accuracy of solving equations, preconditioning of matrix equations, zero divisor

For citation: Zubov, N.E., Ryabchenko, V.N. (2024) Method for preconditioning matrix equations based on zero divisors. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 90. pp. 18–32. doi: 10.17223/19988621/90/2

Введение

В вычислительной алгебре одно из центральных мест занимает левостороннее матричное алгебраическое уравнение

$$AX = B, \quad (1)$$

где $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $\det A \neq 0$.

Существует множество методов решения данного уравнения, которые продолжают развиваться [1, 2]. Однако для того, чтобы обоснованно подбирать методы и алгоритмы решения, объективно судить о корректности поставленной задачи и правильно трактовать полученные результаты, надо знать количественные характеристики степени неопределенности поставленной задачи, влияющие на изменения в решении в зависимости от ошибок в исходных данных.

Если в качестве ошибок исходных данных принять относительную погрешность правой части матричного алгебраического уравнения (1), то такой самой распространенной характеристикой степени неопределенности поставленной выше задачи является оценка относительной погрешности решения системы в зависимости от относительной погрешности ее правой части:

$$\frac{\| \Delta X \|}{\| X \|} = \tau \frac{\| \Delta B \|}{\| B \|}, \quad (2)$$

где $\| \cdot \|$ – матричная норма, индуцированная некоторой векторной нормой.

Из выражения (2), зная численные значения решений, нетрудно получить искомую характеристику степени обусловленности в виде:

$$\tau = \frac{\| \Delta X \| \cdot \| B \|}{\| X \| \cdot \| \Delta B \|}. \quad (3)$$

Однако непосредственное нахождение τ через коэффициенты исходных матриц затруднено вследствие нелинейности операции нормирования. Поэтому в рассмотрение вводится качественная характеристика, называемая числом обусловленности матрицы левой части системы:

$$\text{cond}(A) = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|, \quad (4)$$

удовлетворяющая неравенству

$$\frac{\|\Delta X\|}{\|X\|} \leq \text{cond}(A) \frac{\|\Delta B\|}{\|B\|}. \quad (5)$$

Чем больше число обусловленности, тем сильнее сказывается на решении линейной системы ошибка в исходных данных. Уравнения с матрицей A с большим числом обусловленности называются плохо обусловленными и характеризуются качественной сменой решения

$$X = A^{-1}B \quad (6)$$

при действии малых возмущений ΔB . Исследованию плохо обусловленных уравнений посвящена обширная литература [3–15].

Приведем показательный пример. Пусть задано уравнение (1) вида:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (7)$$

В данном случае число обусловленности матрицы A , вычисленное на основе спектральной нормы $\|\cdot\|_2$, достаточно велико:

$$\text{cond}_2 \left(\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{bmatrix} \right) \approx 4 \cdot 10^4. \quad (8)$$

Заметим, левая часть уравнения (7) заимствована из монографии [10], а правая часть дстроена авторами статьи.

Решение уравнения (7) в данном случае равно

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (9)$$

Предположим, что по каким-либо причинам в матрице (точнее, вектор-матрице) B из (7) изменилось значение первого элемента, и эта матрица приняла вид:

$$B + \Delta B_1 = \begin{bmatrix} 1.0001 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (10)$$

Как видно из (10), мы предположили, что первый элемент матрицы B изменился всего лишь на 0,01% от исходного значения. Однако такое малое изменение правой части (7) приводит к существенному изменению решения уравнения (9). В данном случае оно равно

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}_{\Delta B_1} = \begin{bmatrix} 2.000099 \\ -1 \end{bmatrix}. \quad (11)$$

Очевидно, что решения (9) и (11) существенно различаются. При этом точная количественная характеристика степени обусловленности системы, определяемая в соответствии с выражением (3), равна

$$\tau = \frac{\|\Delta X\| \cdot \|B\|}{\|X\| \cdot \|\Delta B\|} = 20001. \quad (12)$$

Пусть далее

$$B + \Delta B_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ \dots \\ 1.0001 \end{bmatrix} \quad (13)$$

и

$$B + \Delta B_3 = \begin{bmatrix} 0.9999 \\ \dots \\ 1.0001 \end{bmatrix}. \quad (14)$$

Данным возмущениям соответствуют решения

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ \dots \\ x_2 \end{bmatrix}_{\Delta B_2} = \begin{bmatrix} 0 \\ \dots \\ 1 \end{bmatrix} \quad \text{и} \quad \begin{bmatrix} x_1 \\ \dots \\ x_2 \end{bmatrix}_{\Delta B_3} = \begin{bmatrix} -1.000099 \\ \dots \\ 2 \end{bmatrix}.$$

Итак, каждые новые весьма малые возмущения исходных данных приводят к качественно новым решениям рассматриваемого уравнения.

1. Переобусловливание уравнений

В целях уменьшения влияния ошибок в исходных данных, повышения точности решения, а также ускорения сходимости итерационных методов используют различные алгоритмы, заключающиеся, как правило, в элементарных преобразованиях строк (столбцов) одновременно матриц A и B уравнения: масштабирования, регуляризации, балансировке, переобусловливания и т.д. [5, 7].

В самом общем виде такие преобразования сводятся к следующему [3].

Пусть T – некоторая невырожденная ($\det(T) \neq 0$) матрица размерности n . Умножение (1) слева на матрицу T приводит к уравнению

$$TAX = TB, \quad (15)$$

имеющему в силу невырожденности T то же решение, что и уравнение (1).

Введя обозначения

$$A_* = TA, \quad (16)$$

$$B_* = TB, \quad (17)$$

запишем (15) в виде:

$$A_* X = B_*. \quad (18)$$

Хотя (18) алгебраически эквивалентна (1), спектральные характеристики матрицы A_* отличаются от характеристик исходной матрицы A , что, вообще говоря, может быть использовано для повышения скорости получения решения и его точности. При этом окончательное решение может быть записано в виде:

$$X = A_*^{-1} B_*$$

или непосредственно из (15) в виде:

$$\begin{aligned} X &= (T_* A)^{-1} T_* B, \\ Y_* &= (T_* A)^{-1} T_*, \end{aligned} \quad (19)$$

$$X = Y_+ B, \quad (20)$$

позволяющем исследовать влияние изменений (возмущений) в матрице B на конечный результат без осуществления дополнительных преобразований (17).

Утверждается [3], что матрица T должна быть:

- по возможности близка к A^{-1} ;
- легко вычислима;
- легко обратима.

При этом на матрицу T , как правило, не накладывается никаких требований, обусловленных матрицей правой части B . В таких условиях не все преобразования вида (15), несмотря на очевидное изменение числа обусловленности матрицы коэффициентов левой части, приводят к изменению степени обусловленности всего уравнения, которое точным образом определяется выражением (2).

Например, применение переобусловливания вида (15) уравнения (7) на основе LU -факторизации

$$L = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad U = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0.0001 \end{bmatrix}, \quad T_{LU} = L^{-1} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$$

приводит согласно (16), (17) к эквивалентному уравнению с матрицами

$$A_{LU} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0.0001 \end{bmatrix}, \quad B_{LU} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix},$$

имеющему то же решение (9), но с меньшим числом обусловленности левой части $\text{cond}(A_{LU}) = 2 \cdot 10^4$. Однако аналогичная погрешность в матрице правой части (10) приводит к погрешности в решении, в точности совпадающей с (11), а следовательно, характеристика обусловленности уравнения в целом, определяемая выражением (2), осталась неизменной (12). Таким образом, можно утверждать, что в общем случае «улучшение» левой части может приводить к «ухудшению» правой части, которое проявляется, например, в увеличении ее абсолютной погрешности, как в рассмотренном примере:

$$\Delta B_1 = \begin{bmatrix} 0.0001 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \Delta B_{LU} = T_{LU} \Delta B_1 = \begin{bmatrix} 0.0001 \\ -0.0001 \end{bmatrix}.$$

В данной статье ставится и решается задача определения таких матриц переобусловливания, которые наряду с уменьшением числа обусловленности матрицы коэффициентов левой части оставляют неизменной матрицу коэффициентов правой части. Следует заметить, что данному требованию соответствуют матрицы переобусловливания, приводящие выражение (17) к тождеству

$$T_B B = B. \quad (21)$$

Рассматривая (21) как правостороннее матричное уравнение относительно матрицы T и применяя правило: «общее решение неоднородной системы – это частное решение этой системы плюс общее решение соответствующей однородной системы», все множество матриц T_B , удовлетворяющих (21), может быть записано в виде:

$$T_B = I + \phi B_L^\perp, \quad (22)$$

где $B_L^\perp$ – левый делитель нуля полного ранга матрицы B , удовлетворяющий тождеству

$$B_L^\perp B = 0; \quad (23)$$

Φ – матрица произвольных элементов подходящего размера; I – единичная матрица.

Умножение выражения (21) слева на T_B^{-1} приводит к уравнению

$$B = T_B^{-1} B,$$

решение которого также может быть записано в аналогичном (22) виде:

$$T_B^{-1} = I + \mu B_L^\perp,$$

где μ – также матрица произвольных элементов подходящего размера, откуда следует в общем случае неочевидное тождество

$$T_B^{-1} T_B = (I + \mu B_L^\perp)(I + \Phi B_L^\perp) = I.$$

Заметим, что частным случаем обратимости матрицы

$$I_n + \Phi B_L^\perp$$

является, например, матрица вида

$$I_n + B \Phi' B_L^\perp,$$

для которой справедливо тождество

$$(I_n + B \Phi' B_L^\perp)^{-1} = I_n - B \Phi' B_L^\perp,$$

проверяющееся непосредственными вычислениями:

$$(I_n + B \Phi' B_L^\perp)(I_n - B \Phi' B_L^\perp) = I_n - \underbrace{B \Phi' B_L^\perp + B \Phi' B_L^\perp}_0 - \underbrace{B \Phi' B_L^\perp B \Phi' B_L^\perp}_0 = I_n.$$

Итак, выбирая матрицу переобусловливания из множества (22) с учетом требования на ее обратимость $\det(T_B) \neq 0$, можно влиять на обусловленность алгебраических уравнений, не изменяя их правые части:

$$A_B = T_B A = (I + \Phi B_L^\perp) A, \quad (24)$$

$$A_B X = B$$

или

$$(A + \Phi B_L^\perp A) X = B, \quad (25)$$

при этом имеет место решение

$$X = A_B^{-1} B = (A + \Phi B_L^\perp A)^{-1} B, \quad (26)$$

обладающее в условиях присутствующих возмущений при $\text{cond}(A + \Phi B_L^\perp A) \rightarrow 1$ существенно лучшей устойчивостью [4], так как

$$\Delta X = (A + \Phi B_L^\perp A)^{-1} \Delta B.$$

Продemonстрируем это на обсуждавшемся ранее уравнении (7). Для этого выполним следующие операции.

Вычислим левый делитель нуля матрицы

$$B = \begin{bmatrix} 1 \\ \vdots \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Тогда согласно выражению (23) можно положить

$$B_L^\perp = [1 \mid -1],$$

и, следовательно,

$$A + \varphi B_L^\perp A = \left(\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{bmatrix} [1 \mid -1] \right) \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1.0001 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 - 0.0001\varphi_1 \\ 1 & 1.0001 - 0.0001\varphi_2 \end{bmatrix}. \quad (27)$$

Выбирая $\varphi_1 = 0$ и $\varphi_2 = 10001$ для выражения (27), получим

$$A + \varphi B_L^\perp A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}.$$

Тогда

$$\text{cond}_2 \left(\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right) \approx 2.62,$$

что более чем в 15 000 раз меньше, чем у исходной матрицы (8). Непосредственной проверкой убеждаемся, что

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}}_{A + \varphi B_L^\perp A} \cdot \underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}}_X = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix}}_B.$$

Вместе с тем полученная система обладает достаточно высокой устойчивостью к ранее введенным возмущениям (10), (13) и (14), поскольку

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}_{\Delta B_1} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0.0001 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \tau = 1.4142,$$

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}_{-\delta B_3} = \begin{bmatrix} 1.0001 \\ -0.0001 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \tau = 2,$$

$$\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}_{\delta B_3} = \begin{bmatrix} 1.0001 \\ -0.0002 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \tau = 2.2361.$$

Рассмотрим другой пример. Пусть задано матричное уравнение вида (1)

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 100 & 200 & 300 & 400 & 500 & 600 & 700 \end{bmatrix}}_A X = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}}_B, \quad (28)$$

при этом

$$\text{cond}_2(A) \approx 1.4 \cdot 10^4,$$

а решение (28) имеет вид:

$$X = \begin{bmatrix} -2 & -3 & -4 & -5 & -6 & -7 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (29)$$

Вычисление левого делителя нуля матрицы B дает

$$B_L^\perp = [0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 1]. \quad (30)$$

Если выбрать

$$\varphi = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ -0.999 \end{bmatrix}, \quad (31)$$

то согласно (25), (28), (30) и (31) приходим к уравнению

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0.1 & 0.2 & 0.3 & 0.4 & 0.5 & 0.6 & 0.7 \end{bmatrix}}_{A+\varphi B_L^\perp A} X = \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}}_B,$$

имеющему точно такое же решение (29), как и (28), но с числом обусловленности преобразованной матрицы

$$\text{cond}_2(A + \varphi B_L^\perp A) \approx 24,$$

что почти в 585 раз меньше, чем у исходной матрицы.

2. Методики нахождения матриц переобусловливания

Представленные выше примеры имели достаточно простой вид и давали возможность подбирать искомые матрицы преобразования вручную.

Рассмотрим возможные способы выбора «подходящей» матрицы φ , обеспечивающей удовлетворительную обусловленность преобразованной системы. В общем

случае они определяются алгоритмами решения задачи глобальной минимизации, когда требуется найти такую матрицу Φ , что

$$\min_{\Phi} \text{cond} \left(A + \Phi B_L^{\perp} A \right), \quad (32)$$

или эквивалентно

$$\min_{\Phi} \left(\|A + \Phi B_L^{\perp} A\| \cdot \|(A + \Phi B_L^{\perp} A)^{-1}\| \right).$$

Для решения (32) могут быть применены различные методы [3]. Покажем, как данная задача может быть решена на основе метода простой итерации.

Запишем уравнение

$$(I_n + \Phi B_L^{\perp}) A = H, \quad (33)$$

где H – некоторая подходящая матрица с заданным числом обусловленности.

Перепишем (33) в эквивалентном виде:

$$(I_n + \Phi B_L^{\perp}) A + \Phi E = H + \Phi E. \quad (34)$$

Здесь E – прямоугольная обратимая справа матрица (т.е. $\bar{E}^L = 0$) [4], назначение которой будет определено ниже.

Запишем (34) в виде:

$$\Phi E = H - A + \Phi E - \Phi B_L^{\perp} A,$$

или

$$\Phi E = H - A + \Phi (E - B_L^{\perp} A). \quad (35)$$

В силу постулируемой обратимости справа матрицы E уравнение (35) можно переписать в другой форме:

$$\Phi = (H - A) E^+ + \Phi (E - B_L^{\perp} A) E^+, \quad (36)$$

где E^+ – псевдообратная матрица по Муру–Пенроузу:

$$E^+ = E^T (E E^T)^{-1}.$$

Тогда для решения (36) можно записать следующий итерационный процесс:

$$\Phi_{k+1} = (H - A) E^+ + \Phi_k (E - B_L^{\perp} A) E^+. \quad (37)$$

Если матрица E выбрана таким образом, что

$$\|I - B_L^{\perp} A E^+\| < 1,$$

то, согласно теореме о достаточном условии сходимости метода простой итерации, итерационный процесс (37) сходится к решению со скоростью геометрической прогрессии.

Отметим, что из итерационного процесса (37) можно исключить левый делитель нуля $B_L^{\perp}$ в виде прямоугольной матрицы. Для этого достаточно рассмотреть проектор (квадратную матрицу)

$$I_n - B B^+,$$

очевидно, также являющийся левым делителем нуля:

$$(I_n - B B^+) B = B - B B^+ B = 0.$$

Вместо (33) введем в рассмотрение соотношение

$$(I_n - \Phi (I_n - B B^+)) A = H, \quad (38)$$

где Φ – квадратная матрица, играющая ту же роль, что матрица φ в (33).

Осуществляя преобразования (38) к виду:

$$A - \Phi(I_n - BB^+)A = H,$$

или эквивалентно

$$A - \Phi(I_n - BB^+)A + \Phi - \Phi = H,$$

имеем

$$\Phi = H - A + \Phi(I_n - BB^+)A + \Phi.$$

Соответственно, для итерационного процесса имеем

$$\Phi_{k+1} = H - A + \Phi_k(I_n + (I_n - BB^+)A). \quad (39)$$

Поскольку норма матрицы $I_n - (I_n - BB^+)A$ в общем случае не удовлетворяет упомянутой выше теореме о достаточном условии сходимости, вместо (39) лучше использовать процесс вида

$$\Phi_{k+1} = H - A + \Phi_k(E + (I_n - BB^+)A)E^{-1}, \quad (40)$$

или

$$\Phi_{k+1} = H - A + \Phi_k(I_n + (I_n - BB^+)AE^{-1}),$$

где E – подходящая матрица, обеспечивающая

$$\|I_n + (I_n - BB^+)AE^{-1}\| < 1. \quad (41)$$

В качестве необходимого и достаточного условия существования матрицы E , обеспечивающей (41), может быть выдвинуто условие *стабилизированности пары матриц* [16]

$$(I_n, (I_n - BB^+)A). \quad (42)$$

Таким образом, с помощью итерационного процесса (40), (41) может быть решена задача

$$\min_{\Phi} \text{cond}(A - \Phi(I_n - BB^+)A).$$

Недостатком (40) по отношению (37) является повышенный размер вычисляемых элементов. Так, в общем случае число вычисляемых с помощью процесса (37) элементов матрицы φ равно $n(n - \text{rank } B) = n^2 - n \cdot \text{rank } B$. При использовании (40) это число равно n^2 .

Еще один возможный способ определения подходящей матрицы φ основан на оценке снизу числа обусловленности матрицы $(I + \varphi B_L^+)A$ с помощью ее спектрального радиуса или числа обусловленности Тодда. Идея данного способа состоит в следующем.

Переобусловленная с помощью (22) матрица может быть записана в виде суммы

$$A_B = (I + \varphi B_L^+)A = A + \varphi B_L^+A. \quad (43)$$

Транспонирование (43) приводит к выражению

$$\underbrace{(A_B)^T}_{A_B} = \underbrace{A^T}_{A} + \underbrace{(B_L^+A)^T}_{-B^+} \underbrace{\varphi^T}_{K}, \quad (44)$$

которое с точностью до обозначений соответствует задаче нахождения такой обратной связи K , которая обеспечит матрице собственной динамики замкнутой системы $A_{\text{ж}} = A - B'K$ желаемый спектр (множество собственных значений)

$$\Lambda = [\lambda_1 \quad \dots \quad \lambda_n]. \quad (45)$$

Методы решения приведенной задачи достаточно известны и хорошо разработаны [12, 17–20]. Например, при реализации процедуры размещения полюсов пакета Toolbox Control *place* программной оболочки Matlab используется модальный метод Каутского, Никольса и Ван Доорена [19].

Таким образом, определив любым известным способом матрицу Φ^T , обеспечивающую системе (44) желаемые собственные значения (полюсы) (45), и подставив ее транспонированное значение в (22), мы получим матрицу переобусловливания, использование которой приводит исходное уравнение (1) к уравнению с заранее известными характеристиками. Работоспособность приведенного алгоритма продемонстрируем на примере.

Классическим примером плохо обусловленной матрицы является так называемая матрица Гильберта

$$H_n = \left(\frac{1}{i+j-1} \right)_{i,j=1}^n,$$

возникающая, например, при приближении функции многочленом канонического вида методом наименьших квадратов и демонстрирующая катастрофическое возрастание числа обусловленности с ростом размерности [9, 14]. Так, уже при $n = 5$ число обусловленности $\text{cond}(H_5) \approx 4.8 \cdot 10^5$, что определяет высокую чувствительность решения уравнения (1) к незначительным возмущениям в правой части:

$$B_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \\ 1 \end{bmatrix}, \quad X_1 \approx \begin{bmatrix} 5 \\ \dots \\ -120 \\ \dots \\ 630 \\ \dots \\ -1120 \\ \dots \\ 630 \end{bmatrix}, \quad B_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \\ 1.01 \end{bmatrix}, \quad X_2 \approx \begin{bmatrix} 11.3 \\ \dots \\ -246 \\ \dots \\ 1197 \\ \dots \\ -2002 \\ \dots \\ 1071 \end{bmatrix}, \quad \Delta X \approx \begin{bmatrix} 6.3 \\ \dots \\ -126 \\ \dots \\ 567 \\ \dots \\ -882 \\ \dots \\ 441 \end{bmatrix}, \quad (46)$$

$$\delta B = \frac{\|B_2 - B_1\|}{\|B_1\|} \approx 0.005, \quad \delta X = \frac{\|\Delta X\|}{\|X_1\|} \approx 0.8, \quad \tau = \frac{\|\Delta X\| \cdot \|B_1\|}{\|X_1\| \cdot \|\Delta B\|} = \frac{\delta X}{\delta B} \approx 178.2.$$

Использование же переобусловливания на основе LU -факторизации позволяет уменьшить число обусловленности матрицы $A_{LU} = L^{-1}A$ приблизительно в два раза: $\text{cond}(A_{LU}) \approx 2.8 \cdot 10^5$, что, однако, оставляет приведенные выше вычисления (50) практически неизменными.

Расчет матрицы переобусловливания T_B из (22) с учетом (44) с использованием процедуры *place* при фиксировании собственных значений искомой матрицы (45) в виде $\Lambda = [0.01 \quad 0.01 \quad 0.01 \quad 0.01 \quad 1.011]$ приводит к матрице $A_B = T_B A$, имеющей число обусловленности $\text{cond}(A_B) \approx 50$! При этом решения соответствующих уравнений приводят к следующим результатам:

$$B_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \\ 1 \end{bmatrix}, X_1 \approx \begin{bmatrix} 5 \\ \dots \\ -120 \\ \dots \\ 630 \\ \dots \\ -1120 \\ \dots \\ 630 \end{bmatrix}, B_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \\ 1 \\ \dots \\ 1.01 \end{bmatrix}, X_2 \approx \begin{bmatrix} 4.79 \\ \dots \\ -120.5 \\ \dots \\ 631.2 \\ \dots \\ -1122.8 \\ \dots \\ 632.2 \end{bmatrix}, \Delta X \approx \begin{bmatrix} -0.21 \\ \dots \\ -0.5 \\ \dots \\ 1.2 \\ \dots \\ -2.8 \\ \dots \\ 2.2 \end{bmatrix},$$

демонстрирующим высокую устойчивость решения переобусловленного уравнения к возмущениям его правой части: $\delta X \approx 0.0026$, $\tau \approx 0.6$.

Заключение

Количественной характеристикой, наиболее точно отражающей зависимость относительной погрешности решения линейного матричного уравнения вида (1) от относительной погрешности его правой части, является степень обусловленности уравнения τ , определяемая выражением (3). Трудность непосредственного определения τ через коэффициенты исходных матриц вследствие нелинейности операции нормирования приводит к необходимости использования качественной характеристики (4), удовлетворяющей неравенству (5), называемой числом обусловленности матрицы левой части уравнения.

Уравнения с матрицей A с большим числом обусловленности называются плохо обусловленными и характеризуются качественной сменой решения при действии малых возмущений. В целях уменьшения влияния ошибок в исходных данных, повышения точности решения, а также ускорения сходимости итерационных методов используют различные алгоритмы, заключающиеся, как правило, в элементарных преобразованиях строк одновременно матриц A и B уравнения согласно (15). Показано, что, несмотря на очевидное изменение числа обусловленности матрицы коэффициентов левой части, не все такие преобразования приводят к изменению степени обусловленности всего уравнения τ , и «улучшение» левой части может приводить к «ухудшению» правой части.

В данной статье решена задача определения таких матриц переобусловливания согласно (22), которые наряду с изменением числа обусловленности матрицы коэффициентов левой части оставляют неизменной матрицу коэффициентов правой части, что неизбежно приводит к изменению степени обусловленности уравнения τ . Геометрическая интерпретация матричного уравнения второго порядка демонстрирует, что такие преобразования заключаются исключительно во вращении системы вокруг ее точного, хотя еще неизвестного решения. Это позволяет дополнительно повысить точность определения решения, исключив возможные вычислительные погрешности при преобразовании правой части согласно (17).

Показано, что выбор переобусловливателей из множества (22), позволяющих уменьшить степень обусловленности уравнения, может производиться на основе метода простой итерации или с учетом оценки снизу числа обусловленности матрицы левой части путем фиксирования ее собственных значений с помощью известных и хорошо проработанных методов.

В заключение отметим, что изложенные в статье рассуждения относительно левостороннего матричного уравнения вида (1) справедливы как для правостороннего уравнения вида $XA = B$ при переобусловливании справа матрицей

$T_B = I + B_R^\perp \Phi$, так и для двустороннего $AXC = B$ при переобусловливании матрицами $T_{B_L} = I + \Phi_L B_L^\perp$ и $T_{B_R} = I + B_R^\perp \Phi_R$ слева и справа соответственно.

Список источников

1. Mikrin E.A., Zubov N.E., Efanov D.E., Ryabchenko V.N. Superfast iterative solvers for linear matrix equations // *Doklady Mathematics*. 2018. Т. 98, № 2. С. 444–447.
2. Zubov N.E., Ryabchenko V.N. Solution of a linear nondegenerate matrix equation based on the zero divisor // *Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Natural Sciences*. 2021. № 5 (98). С. 49–59.
3. Баландин М.Ю., Шурина М.П. Методы решения СЛАУ большой размерности. Новосибирск : Изд-во НГТУ, 2000.
4. Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А. Матрицы и вычисления. М. : Наука, 1984.
5. Голуб Дж., Ван Лоун Ч. Матричные вычисления. М. : Мир, 1999.
6. Деммель Дж. Вычислительная линейная алгебра. Теория и приложения. М. : Мир, 2001.
7. Икрамов Х.Д. Численное решение матричных уравнений / под ред. Д.К. Фаддеева. М. : Наука, 1984.
8. Марчук Г.И. Методы вычислительной математики. М. : Наука, 1977.
9. Ортега Дж., Пул У. Введение в численные методы решения дифференциальных уравнений. М. : Наука, 1986.
10. Стренг Г. Линейная алгебра и ее применения. М. : Мир, 1980.
11. Тауфер И. Решение граничных задач для систем линейных дифференциальных уравнений. М. : Наука, 1981.
12. Уилкинсон Дж. Алгебраическая проблема собственных значений. М. : Наука, 1970.
13. Форсайт Дж., Малькольм М., Моултер К. Машинные методы математических вычислений. М. : Мир, 1980.
14. Форсайт Дж., Молер К. Численное решение систем линейных алгебраических уравнений. М. : Мир, 1969.
15. Буков В.Н., Рябченко В.Н., Косьянчук В.В., Зыбин Е.Ю. Решение линейных матричных уравнений методом канонизации // *Вестник Киевского национального университета имени Т.Г. Шевченко. Сер. Физико-математические науки*. 2002. Вып. 1. С. 19–28.
16. Поляк Б.Т., Щербаков П.С. Робастная устойчивость и управление. М. : Наука, 2002.
17. Kautsky J., Nichols N.K., Van Dooren P. Robust Pole Assignment in Linear State Feedback // *Int. J. Control*. 1985. V. 41 (5). P. 1129–1155.
18. Справочник по теории автоматического управления / под общ. ред. А.А. Красовского. М. : Наука, 1987.
19. Зубов Н.Е., Микрин Е.А., Рябченко В.Н. Матричные методы в теории и практике систем автоматического управления летательных аппаратов. М. : Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 2016.
20. Кузовков Н.Т. Модальное управление и наблюдающие устройства. М. : Машиностроение, 1976.

References

1. Mikrin E.A., Zubov N.E., Efanov D.E., Ryabchenko V.N. (2018) Superfast iterative solvers for linear matrix equations. *Doklady Mathematics*. 98(2). pp. 444–447.
2. Zubov N.E., Ryabchenko V.N. (2021) Solution of a linear nondegenerate matrix equation based on the zero divisor. *Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Natural Sciences*. 98(5). pp. 49–59.
3. Balandin M.Yu., Shurina M.P. (2000) *Metody resheniya SLAU bol'shoy razmernosti* [Methods for solving high-dimensional SLAEs]. Novosibirsk: Publishing House of NSTU.

4. Voevodin V.V., Kuznetsov Yu.A. (1984) *Matritsy i vychisleniya* [Matrices and calculations]. Moscow: Nauka.
5. Golub G.H., Van Loan C.F. (1996) *Matrix Computations*. Baltimore: Johns Hopkins University Press.
6. Demmel J. (1997) *Applied Numerical Linear Algebra*. Philadelphia, SIAM.
7. Ikramov Kh.D. (1984) *Chislennoye resheniye matrichnykh uravneniy* [Numerical solution of matrix equations]. Moscow: Nauka.
8. Marchuk G.I. (1977) *Metody vychislitel'noy matematiki* [Methods of computational mathematics]. Moscow: Nauka.
9. Ortega J.M., Poole W.G. (1981) *An Introduction to Numerical Methods for Differential Equations*. Lanham, MD: Pitman Publishing.
10. Strang G. (1976) *Linear Algebra and Its Applications*. Cambridge, Mass.: Academic Press.
11. Taufer J. (1981) *Resheniye granichnykh zadach dlya sistem lineynykh differentsial'nykh uravneniy* [Solution of boundary value problems for systems of linear differential equations]. Moscow: Nauka.
12. Wilkinson J.H. (1965) *The Algebraic Eigenvalue Problem*. Oxford: Oxford University Press.
13. Forsythe G.E., Malcolm M.A., Moler C.B. (1977) *Computer Methods for Mathematical Computations*. Hoboken: Prentice Hall.
14. Forsythe G.E., Moler C.B. (1967) *Computer Solution of Linear Algebraic Systems*. Hoboken: Prentice Hall.
15. Bukov V.N., Ryabchenko V.N., Kos'yanchuk V.V., Zybin E.Yu. (2002) Resheniye lineynykh matrichnykh uravneniy metodom kanonizatsii [Solution of linear matrix equations by the canonization method]. *Vestnik Kiyevskogo Natsional'nogo Universiteta imeni T.G. Shevchenko. Ser.: fiziko-matematicheskiye nauki – Bulletin of the Taras Shevchenko National University of Kyiv. Series: Physics and Mathematics*. 1. pp. 19–28.
16. Polyak B.T., Shcherbakov P.S. (2002) *Robastnaya ustoychivost' i upravleniye* [Robust stability and control]. Moscow: Nauka.
17. Kautsky J., Nichols N.K., Van Dooren P. (1985) Robust pole assignment in linear state feedback. *International Journal of Control*. 41(5). pp. 1129–1155.
18. *Spravochnik po teorii avtomaticheskogo upravleniya* [Handbook on the theory of automatic control] (1987) Ed. by A.A. Krasovskiy. Moscow: Nauka.
19. Zubov N.E., Mikrin E.A., Ryabchenko V.N. (2016) *Matrichnyye metody v teorii i praktike sistem avtomaticheskogo upravleniya letatel'nykh apparatov* [Matrix methods in the theory and practice of aircraft automatic control systems]. Moscow: Publishing House of Moscow State Technical University.
20. Kuzovkov N.T. (1976) *Modal'noye upravleniye i nablyudayushchiye ustroystva* [Modal control and monitoring devices]. Moscow: Mashinostroyeniye.

Сведения об авторах:

Зубов Николай Евгеньевич – профессор, доктор технических наук, профессор аспирантуры ПАО РКК «Энергия» им. С.П. Королёва (Королёв, Россия); профессор кафедры систем автоматического управления, декан факультета РКТ МГТУ им. Н.Э. Баумана (Москва, Россия). E-mail: nik.zubov@gmail.com

Рябченко Владимир Николаевич – доцент, доктор технических наук, профессор аспирантуры ПАО РКК «Энергия» им. С.П. Королёва (Королёв, Россия); профессор кафедры систем автоматического управления МГТУ им. Н.Э. Баумана (Москва, Россия). E-mail: ryabchenko.vn@mail.ru

Information about the authors:

Zubov Nikolay E. – Professor, Dr. Sci. (Eng.), Professor, Professor of S.P. Korolev Rocket and Space Public Corporation Energia (Korolev, Russian Federation); Professor of Dep. “Automatic

Control Systems”, Dean of “Rocket and Space Techniques” faculty at Bauman MSTU (Moscow, Russian Federation). E-mail: nik.zubov@gmail.com

Ryabchenko Vladimir N. – Professor, Dr. Sci. (Eng.), Professor, Professor of S.P. Korolev Rocket and Space Public Corporation Energia (Korolev, Russian Federation); Professor of Dep. “Automatic Control Systems” at Bauman MSTU (Moscow, Russian Federation). E-mail: ryabchenko.vn@mail.ru

Статья поступила в редакцию 06.06.2023; принята к публикации 05.08.2024

The article was submitted 06.06.2023; accepted for publication 05.08.2024

Научная статья

УДК 512.552

doi: 10.17223/19988621/90/3

MSC: 16R99

Об автоморфизмах и дифференцированиях редуцированных алгебр и коалгебр инцидентности

Петр Андреевич Крылов¹,
Цырендоржи Дашацыренович Норбосамбуев²

^{1, 2} Томский государственный университет, Томск, Россия

¹ krylov@math.tsu.ru

² nstsddts@yandex.ru

Аннотация. Статья посвящена редуцированным алгебрам и коалгебрам инцидентности, их автоморфизмам и дифференцированиям. Хорошо известны внутренние автоморфизмы и внутренние дифференцирования алгебр. В дополнение к ним в статье выделяется еще два вида автоморфизмов – мультипликативные и порядковые, а также один вид дифференцирований – аддитивные.

Ключевые слова: алгебра инцидентности, коалгебра инцидентности, автоморфизм, дифференцирование

Благодарности: Работа выполнена за счет гранта Российского научного фонда (РНФ) № 23-21-00375, <https://rscf.ru/en/project/23-21-00375/>

Для цитирования: Крылов П.А., Норбосамбуев Ц.Д. Об автоморфизмах и дифференцированиях редуцированных алгебр и коалгебр инцидентности // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2024. № 90. С. 33–39. doi: 10.17223/19988621/90/3

Original article

On automorphisms and derivations of reduced incidence algebras and coalgebras

Piotr A. Krylov¹, Tsyrendorzhi D. Norbosambuev²

^{1, 2} Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation

¹ krylov@math.tsu.ru

² nstsddts@yandex.ru

Abstract. Incidence algebras of partially ordered sets over commutative rings are an important and characteristic example of function rings. From a partially ordered set, one can obtain an incidence coalgebra. Using certain equivalence relations on the set of all intervals of a locally finite poset, reduced incidence algebras and reduced incidence coalgebras

are defined. These objects have a much more complex structure compared to incidence algebras and incidence coalgebras.

This article introduces two types of automorphisms of the reduced incidence algebra – multiplicative and order, as well as one type of derivations – additive derivation. As for incidence coalgebras, there are no works devoted to their automorphisms or derivations. The article discusses a possible approach to the study of automorphisms and derivations of incidence coalgebras.

Keywords: incidence algebra, incidence coalgebra, automorphism, derivation

Acknowledgments: This work was supported by grant of Russian Science Foundation (RSF) no. 23-21-00375, <https://rscf.ru/en/project/23-21-00375/>

For citation: Krylov, P.A., Norbosambuev, T.D. (2024) On automorphisms and derivations of reduced incidence algebras and coalgebras. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 90. pp. 33–39. doi: 10.17223/19988621/90/3

Введение

Алгебры инцидентности и коалгебры инцидентности частично упорядоченных множеств достаточно хорошо известны. Им посвящено множество работ, а также книга [1]. Изучаются различные линейные отображения алгебр инцидентности: автоморфизмы, дифференцирования, антиавтоморфизмы и инволюции (более подробно об этом написано в [2]).

Менее известны редуцированные алгебры и редуцированные коалгебры инцидентности. Редуцированная алгебра инцидентности – это определенная подалгебра алгебры инцидентности. А редуцированная коалгебра инцидентности является некоторой фактор-коалгеброй коалгебры инцидентности. Редуцированные алгебры и коалгебры инцидентности устроены значительно сложнее, чем просто алгебры инцидентности и коалгебры инцидентности.

Основное внимание в статье уделяется автоморфизмам и дифференцированиям редуцированных алгебр и коалгебр инцидентности. Автоморфизмы и дифференцирования алгебр инцидентности давно привлекают внимание специалистов (см.: [1, 2]). В то же время авторам неизвестны работы об автоморфизмах и дифференцированиях редуцированных алгебр и коалгебр инцидентности.

Раздел 1 настоящей работы содержит некоторые вспомогательные сведения для последующих разделов.

В разделе 2 определяются мультипликативные и порядковые автоморфизмы, а также аддитивные дифференцирования редуцированных алгебр инцидентности. Их можно назвать стандартными отображениями. Здесь мы считаем автоморфизм или дифференцирование стандартным, если его строение вполне понятно. Отмечается, что композицией стандартных автоморфизмов не исчерпываются все автоморфизмы редуцированных алгебр инцидентности. Похожая ситуация и для дифференцирований.

В разделе 3 приводятся определения коалгебры инцидентности и редуцированной коалгебры инцидентности. В отличие от алгебр инцидентности автоморфизмы и дифференцирования коалгебр инцидентности в литературе не затрагивались. Затем кратко обсуждается один из возможных подходов к исследованию автоморфизмов и дифференцирований коалгебр инцидентности. Он опирается на

существующий способ связать с данной коалгеброй инцидентности определенную алгебру инцидентности, что позволит использовать известные факты об автоморфизмах и дифференцированиях алгебр инцидентности.

Все алгебры, встречающиеся в статье, – ассоциативные алгебры с ненулевой единицей. Если S – алгебра, то $\text{Aut } S$ – ее группа автоморфизмов.

1. Редуцированные алгебры инцидентности

Кратко изложим некоторый необходимый материал об алгебрах инцидентности. Более детально с ними можно познакомиться в книге [1] и работе [2].

Пусть X – частично упорядоченное множество. Для любых элементов $x, y \in X$ через $[x, y]$ обозначим подмножество $\{z \in X \mid x \leq z \leq y\}$. Оно называется интервалом в X . Договоримся, что все интервалы в X конечны. В таком случае X называется локально конечным частично упорядоченным множеством.

Далее буква R будет обозначать некоторое коммутативное кольцо. Положим $I(X, R) = \{f : X \times X \rightarrow R \mid f(x, y) = 0, \text{ если } x \not\leq y\}$. Функции складываются поточечно и естественным образом умножаются на скаляры из R . Произведение функций f и g задается формулой

$$(fg)(x, y) = \sum_{x \leq z \leq y} f(x, z) \cdot g(z, y) \quad (1)$$

для любых $x, y \in X$. В результате получаем R -алгебру $I(X, R)$, называемую алгеброй инцидентности частично упорядоченного множества X над кольцом R . Конкретную алгебру $I(X, R)$ обычно обозначаем буквой A .

Редуцированная алгебра инцидентности определяется с помощью некоторого отношения эквивалентности на множестве всех интервалов частично упорядоченного множества X . Такое отношение будем обозначать символом $\sim$.

Определение. Пусть дано отношение эквивалентности $\sim$ на множестве всех интервалов частично упорядоченного множества X , причем всякий раз из того, что $[x, y] \sim [s, t]$ следует существование биекции $\varepsilon : [x, y] \rightarrow [s, t]$, для которой выполняются соотношения $[x, z] \sim [s, \varepsilon(z)]$ и $[z, y] \sim [\varepsilon(z), t]$ для каждого $z \in [x, y]$. Говорят, что $\sim$ – отношение, совместимое с порядком.

Пусть $\sim$ – отношение, совместимое с порядком. Обозначим через $I(X_{\sim})$ совокупность всех функций f из $I(X, R)$, для которых всякий раз из того, что $[x, y] \sim [s, t]$ следует $f(x, y) = f(s, t)$. Иными словами, f является константой на классах эквивалентности отношения $\sim$. Проверка показывает, что $I(X_{\sim})$ – подалгебра алгебры $I(X, R)$ [1. Предложение 1.3.5]. Она носит название редуцированной алгебры инцидентности.

Итак, редуцированные алгебры инцидентности – это определенные подалгебры алгебр инцидентности. Они образуют обширный и довольно сложный класс алгебр. Например, кольцо формальных степенных рядов $R[[x]]$ изоморфно некоторой подобной алгебре.

2. Стандартные автоморфизмы и дифференцирования

Как и раньше, символ $I(X, R)$ обозначает алгебру инцидентности, а A – какая-то редуцированная алгебра инцидентности $I(X_{\sim})$.

Рассмотрим несколько видов стандартных автоморфизмов и дифференцирований.

1. Известными представителями стандартных автоморфизмов и дифференцирований являются внутренние автоморфизмы и внутренние дифференцирования. Правда, если кольцо $I(X, R)$ коммутативно, то они тривиальны.

2. Мультипликативные автоморфизмы.

Пусть для каждого $x, y \in X$ с условием $x < y$ дан обратимый элемент c_{xy} кольца R , причем $c_{xy} = c_{xz} \cdot c_{zy}$ как только $x < z < y$. Множество элементов $\{c_{xy} \mid x < y\}$ называется мультипликативной системой [2]. Каждая мультипликативная система $\{c_{xy} \mid x < y\}$ дает автоморфизм μ алгебры $I(X, R)$. Именно, для каждой функции f из $I(X, R)$ полагаем $(\mu(f))(x, x) = f(x, x)$ для всех $x \in X$ и $(\mu(f))(x, y) = c_{xy} f(x, y)$ для всех $x, y \in X$ с условием $x < y$. Автоморфизм μ называется мультипликативным автоморфизмом, соответствующим мультипликативной системе $\{c_{xy} \mid x < y\}$. Все мультипликативные автоморфизмы образуют нормальную подгруппу в группе $\text{Aut } I(X, R)$.

Предположим, что мультипликативная система $\{c_{xy} \mid x < y\}$ обладает дополнительным свойством: для любых интервалов $[x, y]$ и $[u, v]$ из $[x, y] \sim [u, v]$ следует $c_{xy} = c_{uv}$. Проверим, что мультипликативный автоморфизм, соответствующий этой системе, индуцирует автоморфизм алгебры A . Если $[x, x] \sim [u, u]$, то $(\mu(f))(x, x) = f(x, x) = f(u, u) = (\mu(f))(u, u)$. Аналогично, если $[x, y] \sim [u, v]$, где $x < y$, $u < v$, то $(\mu(f))(x, y) = c_{xy} f(x, y) = c_{uv} f(u, v) = (\mu(f))(u, v)$. Делаем вывод, что $\mu(f) \in A$.

Ясно, что система элементов $\{c_{xy}^{-1} \mid x < y\}$ является мультипликативной системой и ей соответствует автоморфизм μ^{-1} . Как и выше, можно убедиться, что $\mu^{-1}(f) \in A$. Следовательно, ограничение μ на A является автоморфизмом алгебры A . Назовем его тоже мультипликативным. Все мультипликативные автоморфизмы алгебры A образуют нормальную подгруппу в $\text{Aut } A$.

3. Порядковые автоморфизмы.

Пусть τ – автоморфизм частично упорядоченного множества X . Известно, что τ индуцирует автоморфизм алгебры $I(X, R)$, для обозначения которого сохраним букву τ . Именно, для любой функции f из $I(X, R)$ и каждой пары элементов (x, y) с условием $x \leq y$ положим $(\tau(f))(x, y) = f(\tau(x), \tau(y))$. Предположим, что автоморфизм τ согласован с отношением эквивалентности $\sim$ в следующем смысле: если $[x, y] \sim [u, v]$, то $[\tau(x), \tau(y)] \sim [\tau(u), \tau(v)]$.

Убедимся, что τ индуцирует автоморфизм алгебры A . Имеется в виду, что ограничение автоморфизма τ на алгебре A является автоморфизмом этой алгебры. Пусть $f \in A$ и $[x, y] \sim [u, v]$. Тогда $[\tau(x), \tau(y)] \sim [\tau(u), \tau(v)]$. И далее находим $(\tau(f))(x, y) = f(\tau(x), \tau(y)) = f(\tau(u), \tau(v)) = (\tau(f))(u, v)$. Заключаем, что $\tau A \subseteq A$. Похожим образом можно рассуждать и для обратного автоморфизма τ^{-1} (он также согласован с $\sim$) и получить, что $\tau^{-1} A \subseteq A$. Следовательно, $\tau A = A$ и $\tau \in \text{Aut } A$.

Замечание. Если в качестве отношения $\sim$ взять изоморфизм интервалов как частично упорядоченных множеств, то любой автоморфизм τ будет согласован с отношением эквивалентности $\sim$.

4. Аддитивные дифференцирования.

Определение [2]. Назовем аддитивной системой такую совокупность элементов $\{d_{xy} \in R \mid x < y\}$, что $d_{xy} = d_{xz} + d_{zy}$ для всех x, y, z с условием $x < z < y$. С каждой аддитивной системой $\{d_{xy} \mid x < y\}$ можно ассоциировать дифференцирование d алгебры $I(X, R)$. Надо положить $(d(f))(x, x) = 0$ для всех $x \in X$ и $(d(f))(x, y) = d_{xy}f(x, y)$, где $x, y \in X$ и $x < y$.

Все аддитивные дифференцирования образуют подмодуль в R -модуле дифференцирований алгебры $I(X, R)$.

Предположим, что дана аддитивная система $\{d_{xy} \mid x < y\}$ с условием $d_{xy} = d_{uv}$ для любых эквивалентных интервалов $[x, y]$ и $[u, v]$. Обозначим через δ дифференцирование алгебры $I(X, R)$, соответствующее этой системе в смысле, раскрытом в предыдущем абзаце. Как и в ситуации с мультипликативными автоморфизмами в пункте 2, несложно проверить, что $\delta A \subseteq A$. Следовательно, δ индуцирует дифференцирование алгебры A . Удобно тоже назвать его аддитивным дифференцированием.

Пусть R – коммутативное неразложимое кольцо. Тогда каждый автоморфизм R -алгебры инцидентности $I(X, R)$ является произведением следующих трех стандартных автоморфизмов: внутреннего, мультипликативного и порядкового. А каждое дифференцирование записывается в виде суммы внутреннего и аддитивного дифференцирований (см.: [1, 2]).

Положение для редуцированной алгебры инцидентности $I(X_{\sim})$ намного более сложное. В разделе 1 замечено, что алгебра $R[[x]]$ изоморфна определенной редуцированной алгебре инцидентности. А как известно, подстановка в каждый ряд из $R[[x]]$ некоторого фиксированного ряда приводит к автоморфизму алгебры $R[[x]]$. Такие автоморфизмы, как правило, не относятся к стандартным. Алгебра $R[[x]]$ обладает также нестандартными дифференцированиями.

3. Коалгебры инцидентности, их автоморфизмы и дифференцирования

Коалгебра – это математический объект, двойственный к алгебре (в смысле обращения стрелок).

С этого места буква F обозначает какое-то поле. Пусть (C, Δ, ϵ) – некоторая коалгебра над полем F . Таким образом, C – F -пространство, Δ – коумножение в C , а ϵ – коединица для C . Для обозначения этой коалгебры будем использовать одну букву C .

Как и раньше, X – локально конечное частично упорядоченное множество. Пусть C – векторное пространство над полем F , базис которого состоит из всех интервалов $[x, y]$ множества X . Определим отображения $\Delta: C \rightarrow C \otimes C$ и $\epsilon: C \rightarrow F$, полагая

$$\Delta([x, y]) = \sum_{x \leq z \leq y} [x, z] \otimes [z, y], \quad \epsilon([x, y]) = \begin{cases} 1, & \text{если } x = y \\ 0, & \text{если } x \neq y \end{cases} \quad (2)$$

для всякого базисного вектора $[x, y]$. Естественным образом Δ и ϵ продолжаются до коумножения и коединицы для пространства C .

Тройка (C, Δ, ε) является коалгеброй. Она называется коалгеброй инцидентности локально конечного частично упорядоченного множества X . Обозначаем коалгебру (C, Δ, ε) символом $Co(X, F)$. Теория алгебр и коалгебр инцидентности достаточно полно представлена в книге [1].

Двойственная алгебра $Co(X, F)^*$ к коалгебре $Co(X, F)$ канонически изоморфна алгебре инцидентности $I(X, R)$. При этом важно, что автоморфизмы и дифференцирования коалгебры $Co(X, F)$ индуцируют автоморфизмы и дифференцирования соответственно двойственной алгебры $Co(X, F)^*$, а затем алгебры $I(X, F)$.

Опираясь на изложенные обстоятельства, развивается следующий подход к исследованию автоморфизмов и дифференцирований коалгебры $Co(X, F)$. От коалгебры $Co(X, F)$ мы переходим к алгебре $I(X, F)$. Затем используем известные свойства и строение автоморфизмов либо дифференцирований данной алгебры. В завершение этой процедуры нужно вернуться обратно к коалгебре $Co(X, F)$. Но это значительно более сложная задача.

Из предпоследнего абзаца раздела 2 можно заключить, что строение группы автоморфизмов и пространства дифференцирований F -алгебры $I(X, F)$ в целом известны. Основываясь на соответствующей информации и реализуя идеи, изложенные выше, удалось вычислить группу автоморфизмов и пространство дифференцирований коалгебры $Co(X, F)$. Оказалось, что группа автоморфизмов коалгебры $Co(X, F)$ антиизоморфна группе автоморфизмов алгебры $I(X, F)$. А пространства дифференцирований этих объектов изоморфны. Решающую роль здесь сыграли предложенные аналоги стандартных автоморфизмов и стандартных дифференцирований, фигурирующих в разделе 2. Соответствующие результаты готовятся к публикации.

Двойственным аналогом редуцированных алгебр инцидентности можно назвать редуцированные коалгебры инцидентности [1]. Пусть как в разделе 1 дано отношение эквивалентности $\sim$ на множестве всех интервалов локально конечного частично упорядоченного множества X , совместимое с порядком. Обозначим через $Co(X_-)$ векторное пространство над полем F , базис которого образуют все типы множества X относительно отношения $\sim$. Исходя из типов, можно так задать коумножение и коединицу для $Co(X_-)$, что получится коалгебра (см.: [1]). Собственно говоря, структура этой коалгебры определяется равенствами (2). Коалгебру $Co(X_-)$ называют редуцированной коалгеброй инцидентности множества X . Она изоморфна определенной фактор-коалгебре коалгебры $Co(X, F)$. Двойственная алгебра $Co(X_-)^*$ к коалгебре $Co(X_-)$ канонически изоморфна редуцированной алгебре инцидентности $I(X_-)$. Фактически нужный изоморфизм индуцируется изоморфизмом $Co(X, F)^* \cong I(X, F)$ (о нем упоминается в этом разделе).

При изучении автоморфизмов и дифференцирований коалгебры $Co(X_-)$ после некоторых модификаций в целом годится подход, кратко изложенный выше для случая коалгебры $Co(X, F)$.

Список источников

1. Spiegel E., O'Donnell C.J. Incidence Algebras. New York : Marcel Dekker, 1997. 334 p.
2. Krylov P., Tuganbaev A. Incidence rings: automorphisms and derivations // arXiv:2305.02984v1 [math.RA]. 2023. doi: 10.48550/arXiv.2305.02984

References

1. Spiegel E., O'Donnell C.J. (1997) *Incidence Algebras*. New York: Marcel Dekker.
2. Krylov P., Tuganbaev A. (2023) Incidence rings: automorphisms and derivations. arXiv:2305.02984v1 [math.RA]. DOI: 10.48550/arXiv.2305.02984.

Сведения об авторах:

Крылов Петр Андреевич – доктор физико-математических наук, профессор, профессор кафедры алгебры механико-математического факультета Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: krylov@math.tsu.ru

Норбосамбуев Цырендоржи Дашацыренович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры алгебры механико-математического факультета Томского государственного университета, старший научный сотрудник Регионального научно-образовательного математического центра Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: nstsddts@yandex.ru

Information about the authors:

Krylov Piotr A. (Doctor of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: krylov@math.tsu.ru

Norbosambuev Tsyrendorzhi D. (Candidate of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: nstsddts@yandex.ru

Статья поступила в редакцию 04.03.2024; принята к публикации 05.08.2024

The article was submitted 04.03.2024; accepted for publication 05.08.2024

Научная статья

УДК 512.531.2

MSC: 20M10

doi: 10.17223/19988621/90/4

Прямые произведения циклических полугрупп с нулем, допускающие внешнепланарные и обобщенные внешнепланарные графы Кэли

Денис Владимирович Соломатин

*Омский государственный педагогический университет, Омск, Россия,
solomatin_dv@omgpu.ru, denis_2001j@bk.ru*

Аннотация. Приводятся характеристические свойства прямых произведений полугрупп с нулем, допускающих внешнепланарные графы Кэли, а также их обобщения на языке определяющих соотношений.

Ключевые слова: правые графы Кэли полугрупп, планарные графы, полугруппы с нулем, прямые произведения полугрупп, внешнепланарные графы

Для цитирования: Соломатин Д.В. Прямые произведения циклических полугрупп с нулем, допускающие внешнепланарные и обобщенные внешнепланарные графы Кэли // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2024. № 90. С. 40–49. doi: 10.17223/19988621/90/4

Original article

Direct products of cyclic semigroups with zero, admitting outerplanar and generalized outerplanar Cayley graphs

Denis V. Solomatin

*Omsk State Pedagogical University, Omsk, Russian Federation,
solomatin_dv@omgpu.ru, denis_2001j@bk.ru*

Abstract. The article presents the characteristic properties of direct products of semigroups with zero admitting outerplanar Cayley graphs, as well as their generalizations in the defining relations of copresentation.

Theorem 1. A finite semigroup S with zero that is a direct product of nontrivial cyclic semigroups with zero admits an outerplanar Cayley graph if and only if one of the following conditions holds:

- 1) $S \cong \langle a \mid a^3 = a^2 \rangle^0 \times \langle b \mid b^{h+1} = b^h \rangle^0$ where h is a natural number and $h < 4$;
- 2) $S \cong \langle a_0 \mid a_0^{r+1} = a_0^r \rangle \times \prod_{i=1}^n \langle a_i \mid a_i^{2+1} = a_i^2 \rangle$ where r and n are natural numbers and $r \leq 2$;
or $r = 3, n = 1$;

3) $S \cong \langle a \mid a^{r+m} = a^r \rangle^{+0} \times \langle b \mid b^2 = b \rangle^{+0}$ where r and m are natural numbers and $m \leq 2$;

4) $S \cong \langle a_0 \mid a_0^{r+1} = a_0^r \rangle \times \prod_{i=1}^n \langle a_i \mid a_i^2 = a_i \rangle^{+0}$ where $n = 1$; or $r = 1, n = 2$.

Theorem 2. A finite semigroup S with zero that is a direct product of nontrivial cyclic semigroups with zero admits a generalized outerplanar Cayley graph if and only if one of the following conditions holds:

1) $S \cong \langle a \mid a^{r+m} = a^r \rangle^{+0} \times \langle b \mid b^{h+t} = b^h \rangle^{+0}$ where for natural numbers r, m, h, t one of the following restrictions is satisfied:

1.1) $r = 2, m = 1, h < 4, t = 1$;

1.2) $r = 3, m = 1, h = 3, t = 1$;

2) $S \cong \langle a_0 \mid a_0^{r+1} = a_0^r \rangle \times \prod_{i=1}^n \langle a_i \mid a_i^{2+1} = a_i^2 \rangle$ where r and n are natural numbers and $r \leq 3$;

3.1) $S \cong \langle a \mid a^{2+1} = a^2 \rangle \times \langle b \mid b^{2+1} = b^2 \rangle^{+0}$;

3.2) $S \cong \langle a \mid a^{r+m} = a^r \rangle^{+0} \times \langle b \mid b^2 = b \rangle^{+0}$ where r and m are natural numbers and $m \leq 2$;

4) $S \cong \langle a_0 \mid a_0^{r+1} = a_0^r \rangle \times \prod_{i=1}^n \langle a_i \mid a_i^2 = a_i \rangle^{+0}$ where $n = 1$; or $r = 1, n = 2$.

Keywords: right Cayley graphs of semigroups, planar graphs, semigroups with zero, direct products of semigroups, outerplanar graphs

For citation: Solomatin, D.V. (2024) Direct products of cyclic semigroups with zero, admitting outerplanar and generalized outerplanar Cayley graphs. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 90. pp. 40–49. doi: 10.17223/19988621/90/4

Введение

Исследуя свойство планарности графов Кэли полугрупп, мы раз за разом возвращаемся к истокам – циклическим полугруппам и различным вариациям на эту тему. А так как для изучения полугрупповых многообразий принципиальное значение имеют прямые произведения полугрупп, подполугруппы и их гомоморфные образы, то не теряет актуальности тематика настоящей статьи. Кроме того, прямые произведения циклических полугрупп с нулем находят применение в теории алгоритмов и теории автоматов. Они используются для моделирования конечных автоматов, которые представляют собой системы с конечным числом состояний. Заключительное состояние в таком автомате, как правило, соответствует нулевому элементу, в отличие от моноидов, когда начальному состоянию автомата зачастую соответствует единица. Конечные автоматы широко применяются в различных областях, таких как информатика, электроника, теория управления и обработка текстов естественного языка. Они также играют ключевую роль в разработке компиляторов, проектировании микропроцессоров, анализе и синтезе речи и многом другом. В частности, прямые произведения циклических групп с нулем могут использоваться при создании недетерминированных конечных автоматов для моделирования параллельных вычислительных систем и систем с недетерминированным поведением.

1. Основные факты и определения

Необходимые для понимания статьи сведения из теории графов можно почерпнуть в [1], развернутую мотивацию изучения обобщенных внешнепланарных графов – в [2], а имеющиеся сведения о полугруппах с планарными графами Кэли – в обзоре [3]. Напомним лишь, что правым графом Кэли полугруппы $S = \langle X \rangle$, или просто графом Кэли полугруппы относительно множества образующих ее элементов $X \subseteq S$, называется ориентированный мультиграф $\text{Cay}(S; X) = (S, A)$, в котором задана совокупность дуг $A = \{(u, v) \mid u \in S, v \in S, \exists x \in X : ux = v\}$ и задано отображение $\varphi : A \rightarrow X$, ставящее в соответствие каждой дуге из A метку в X . Множество вершин графа $\text{Cay}(S; X)$ состоит из элементов полугруппы S . Помеченные дуги графа $\text{Cay}(S; X)$ представляют собой элементы совокупности A , начинаются в вершине $u \in S$, заканчиваются в вершине $v \in S$, помечены элементом $x \in X$ тогда и только тогда, когда $ux = v$. Двойственным образом через равенство $xu = v$ определяются левые графы Кэли полугрупп, в коммутативном случае совпадающие с правыми. Более того, для моноидов как полугрупп с единицей e эти графы являются частным случаем двусторонних графов Кэли $2\text{SCay}(S; L, R) = (S, \{(u, v) \mid u \in S, v \in S, \exists l \in L, \exists r \in R : lu = vr\})$; в самом деле, чтобы получить односторонний граф Кэли, достаточно взять $R = \{e\}$ или $L = \{e\}$.

Заметим, что наличие петель в ориентированном мультиграфе, кратных ребер, их направленностей и пометок не влияет на возможность плоской укладки графа, то есть такого вложения в плоскость, что вершины графа изображены точками плоскости, а ребра – непрерывными плоскими линиями без самопересечений, так называемыми жордановыми кривыми, не имеющими общих точек, кроме, возможно, общих вершин. Следовательно, имеет смысл переход к так называемым основам графов Кэли $\text{SCay}(S; X) = (S, \{\{a, b\} \mid a \in S, b \in S, \exists x \in X : ax = b\})$ путем удаления петель, направленностей, меток и замены параллельных ребер одним ребром, соединяющим те же вершины исходного графа. Тогда корректным будет перенос следующих свойств обыкновенных графов на графы Кэли полугрупп.

Определение 1. Внешнепланарной укладкой графа называется такая укладка графа на плоскости, при которой все вершины графа принадлежат единственной внешней грани.

Определение 2. Обобщенной внешнепланарной укладкой графа называется такая укладка графа на плоскости, при которой каждое ребро графа принадлежит внешней грани хотя бы одним из своих концов.

Сформулируем критерии внешней планарности и обобщенной внешней планарности.

Предложение 1. Полугруппа допускает внешнепланарный граф Кэли если и только если относительно некоторого множества образующих основа графа Кэли этой полугруппы не содержит подграфов, гомеоморфных графам Чартрэнда–Харари K_4 или $K_{2,3}$, то есть полному графу, восстановленному на четырех вершинах, или полному двудольному графу, содержащему две вершины в одной и три вершины в другой доле графа в обозначениях из [1].

Аналогичным образом формулируется критерий обобщенной внешнепланарности.

Предложение 2. Полугруппа допускает обобщенный внешнепланарный граф Кэли если и только если относительно некоторого множества образующих основа графа Кэли этой полугруппы не содержит подграфов, стягиваемых к графам Седлачека из множества графов $\{G_i \mid i = 1 \div 12\}$ в обозначениях из [4].

Условимся различать операции присоединения нуля и операции внешнего присоединения нуля к полугруппе S . В первом случае нуль добавляем, только когда он отсутствует в полугруппе S , и соответствующую полугруппу обозначаем, как обычно, через S^0 . Во втором случае нуль присоединяем всегда и полученную полугруппу будем обозначать через S^{+0} . Внешнее присоединение нуля происходит следующим способом: присоединяем к полугруппе S новый элемент 0 и доопределяем операцию на множестве $S \cup \{0\}$, полагая $0 \cdot 0 = 0 \cdot x = x \cdot 0 = 0$ для любого $x \in S$. Под циклической полугруппой с нулем понимается любой гомоморфный образ свободной однопорожденной полугруппы с нулем. Очевидно, что любая циклическая полугруппа с нулем либо изоморфна циклической нильполугруппе, либо получена из циклической полугруппы внешним присоединением нуля.

2. Основной результат

Основным результатом данной заметки являются следующие две теоремы.

Теорема 1. Конечная полугруппа S с нулем, являющаяся прямым произведением неоднородных циклических полугрупп с нулем, допускает внешнепланарный граф Кэли тогда и только тогда, когда выполняется одно из следующих условий:

- 1) $S \cong \langle a \mid a^3 = a^2 \rangle^0 \times \langle b \mid b^{h+1} = b^h \rangle^0$, где h – натуральное число, причем $h < 4$;
- 2) $S \cong \langle a_0 \mid a_0^{r+1} = a_0^r \rangle \times \prod_{i=1}^n \langle a_i \mid a_i^{2+1} = a_i^2 \rangle$, где r и n – натуральные числа, причем $r \leq 2$; или $r = 3, n = 1$;
- 3) $S \cong \langle a \mid a^{r+m} = a^r \rangle^{+0} \times \langle b \mid b^2 = b \rangle^{+0}$, где r и m – натуральные числа, причем $m \leq 2$;
- 4) $S \cong \langle a_0 \mid a_0^{r+1} = a_0^r \rangle \times \prod_{i=1}^n \langle a_i \mid a_i^2 = a_i \rangle^{+0}$, где $n = 1$; или $r = 1, n = 2$.

Теорема 2. Конечная полугруппа S с нулем, являющаяся прямым произведением неоднородных циклических полугрупп с нулем, допускает обобщенный внешнепланарный граф Кэли тогда и только тогда, когда выполняется одно из следующих условий:

- 1) $S \cong \langle a \mid a^{r+m} = a^r \rangle^0 \times \langle b \mid b^{h+t} = b^h \rangle^0$, где для натуральных чисел r, m, h, t выполняется одно из следующих ограничений:
 - 1.1) $r = 2, m = 1, h < 4, t = 1$;
 - 1.2) $r = 3, m = 1, h = 3, t = 1$;
- 2) $S \cong \langle a_0 \mid a_0^{r+1} = a_0^r \rangle \times \prod_{i=1}^n \langle a_i \mid a_i^{2+1} = a_i^2 \rangle$, где r и n – натуральные числа, причем $r \leq 3$;

$$3.1) S \cong \langle a \mid a^{2+1} = a^2 \rangle \times \langle b \mid b^{2+1} = b^2 \rangle^{+0};$$

3.2) $S \cong \langle a \mid a^{r+m} = a^r \rangle^{+0} \times \langle b \mid b^2 = b \rangle^{+0}$, где r и m – натуральные числа, причем $m \leq 2$;

$$4) S \cong \langle a_0 \mid a_0^{r+1} = a_0^r \rangle \times \prod_{i=1}^n \langle a_i \mid a_i^2 = a_i \rangle^{+0}, \text{ где } n = 1; \text{ или } r = 1, n = 2.$$

Доказательство теорем опирается на следующую лемму, приведенную в [3] как Теорема 23.

Лемма. Конечная полугруппа S с нулем, являющаяся прямым произведением неоднородных циклических полугрупп с нулем, допускает планарный граф Кэли тогда и только тогда, когда выполняется одно из следующих условий:

1) $S \cong \langle a \mid a^{r+m} = a^r \rangle \times \langle b \mid b^{h+t} = b^h \rangle$, где для натуральных чисел r, m, h, t выполняется одно из следующих ограничений:

$$1.1) r = 2, m = 1, h < 5, t = 1;$$

$$1.2) r = 3, m = 1, h = 3, t = 1;$$

$$1.3) r = 2, m = 1, h = 1, t = 2;$$

2) $S \cong \langle a_0 \mid a_0^{r+1} = a_0^r \rangle \times \prod_{i=1}^n \langle a_i \mid a_i^{2+1} = a_i^2 \rangle$, где r – натуральное число, причем $r \leq 3$.

$$3.1) S \cong \langle a \mid a^{2+1} = a^2 \rangle \times \langle b \mid b^{2+1} = b^2 \rangle^{+0};$$

3.2) $S \cong \langle a \mid a^{r+m} = a^r \rangle^{+0} \times \langle b \mid b^2 = b \rangle^{+0}$, где r и m – натуральные числа, причем $m \leq 2$;

$$4) S \cong \langle a_0 \mid a_0^{r+1} = a_0^r \rangle \times \prod_{i=1}^n \langle a_i \mid a_i^2 = a_i \rangle^{+0}, \text{ где } n \leq 2; \text{ или } r = 1, n \leq 3.$$

Доказательство. Рассмотрим каждый случай в отдельности. Одновременное доказательство двух теорем осуществим согласно следующей общей схеме: перебираем варианты ограничений из Леммы. Если окажется так, что условие теоремы выполнено, то граф Кэли соответствующей полугруппы с нулем допускает внешнепланарную укладку или обобщенную внешнепланарную укладку, иначе в основе этого графа обнаруживается подграф, гомеоморфный графу K_4 или $K_{2,3}$ (тогда граф не является внешнепланарным), или одному из графов Седлачека (в этом случае граф не является обобщенным внешнепланарным).

При выполнении условий пункта 1.1 из Леммы для $h < 4$ граф Кэли соответствующей полугруппы допускает внешнепланарную укладку относительно множества неразложимых образующих $\{(a;b), (a;b^2), (a;b^3), (a^2;b)\}$. А именно, основа графа Кэли двухэлементной полугруппы $\langle a \mid a^3 = a^2 \rangle \times \langle b \mid b^2 = b^1 \rangle^0$ является внешнепланарным паросочетанием; основа графа Кэли четырехэлементной полугруппы $\langle a \mid a^3 = a^2 \rangle \times \langle b \mid b^3 = b^2 \rangle^0$ является внешнепланарной звездой; наконец, такая укладка основы графа Кэли шестиэлементной полугруппы $\langle a \mid a^3 = a^2 \rangle \times \langle b \mid b^4 = b^3 \rangle^0$, что все ее вершины принадлежат внешней грани, приведена на рис. 1. Дальнейшее увеличение параметра до $h = 4$ приводит к появлению изображенного

на рис. 2 подграфа основы графа Кэли формируемой полугруппы, гомеоморфного графу G_{10} . Следовательно, граф не является обобщенным внешнепланарным и не является внешнепланарным. Заметим, что здесь и в дальнейшем при любой системе образующих X полугруппы S в основе графа Кэли $SCay(S; X)$ будет возникать найденный подграф, гомеоморфный одному из запрещенных графов, и ни при какой другой системе образующих этого нельзя будет избежать, так как подграфы строятся относительно минимального множества неразложимых образующих элементов, присутствующего в качестве подмножества в любом другом множестве образующих.

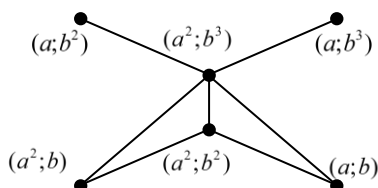


Рис. 1. Внешнепланарная укладка основы графа Кэли полугруппы

$$S = \langle a \mid a^3 = a^2 \rangle^0 \times \langle b \mid b^4 = b^3 \rangle^0$$

Fig. 1. Outerplanar embedding of the base of the Cayley graph of semigroup

$$S = \langle a \mid a^3 = a^2 \rangle^0 \times \langle b \mid b^4 = b^3 \rangle^0$$

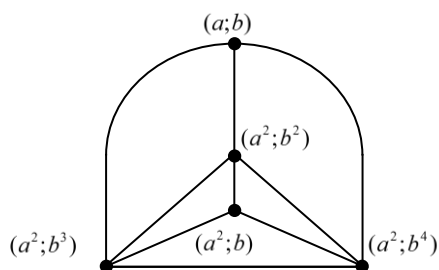


Рис. 2. Подграф основы графа Кэли полугруппы $S = \langle a \mid a^3 = a^2 \rangle^0 \times \langle b \mid b^5 = b^4 \rangle^0$

Fig. 2. Subgraph of the base of the Cayley graph of semigroup $S = \langle a \mid a^3 = a^2 \rangle^0 \times \langle b \mid b^5 = b^4 \rangle^0$

При выполнении условий пункта 1.2 из Леммы основа графа Кэли соответствующей полугруппы не является внешнепланарной, так как содержит изображенный на рис. 3 подграф, гомеоморфный графу $K_{2,3}$, но будет обобщенной внешнепланарной.

В случае выполнения ограничений пункта 1.3 из Леммы основа графа Кэли соответствующей полугруппы содержит изображенный на рис. 4 подграф, гомеоморфный графу G_{10} , следовательно, граф не является обобщенным внешнепланарным и не является внешнепланарным.

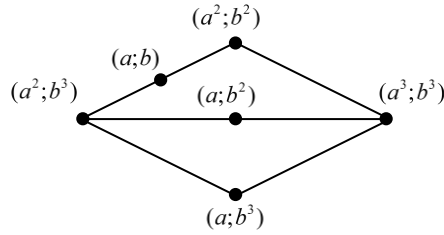


Рис. 3. Подграф основы графа Кэли полугруппы $S = \langle a \mid a^4 = a^3 \rangle^0 \times \langle b \mid b^4 = b^3 \rangle^0$

Fig. 3. Subgraph of the base of the Cayley graph of semigroup $S = \langle a \mid a^4 = a^3 \rangle^0 \times \langle b \mid b^4 = b^3 \rangle^0$

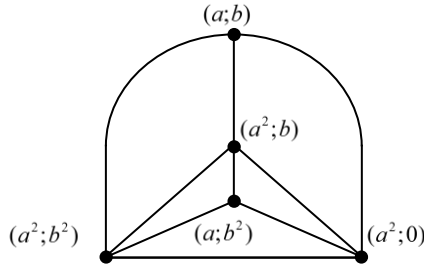


Рис. 4. Подграф основы графа Кэли полугруппы $S = \langle a \mid a^3 = a^2 \rangle^0 \times \langle b \mid b^3 = b \rangle^0$

Fig. 4. Subgraph of the base of the Cayley graph of semigroup $S = \langle a \mid a^3 = a^2 \rangle^0 \times \langle b \mid b^3 = b \rangle^0$

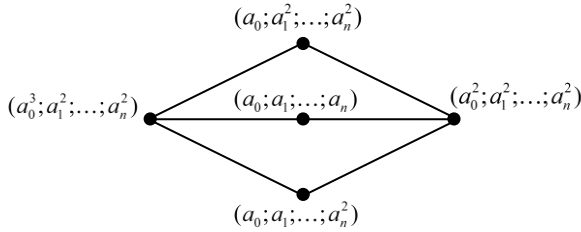


Рис. 5. Подграф основы графа Кэли полугруппы $S = \langle a_0 \mid a_0^4 = a_0^3 \rangle \times \prod_{i=1}^n \langle a_i \mid a_i^3 = a_i^2 \rangle$, при $n > 1$

Fig. 5. Subgraph of the base of the Cayley graph of semigroup

$$S = \langle a_0 \mid a_0^4 = a_0^3 \rangle \times \prod_{i=1}^n \langle a_i \mid a_i^3 = a_i^2 \rangle \text{ with } n > 1$$

На рис. 5 изображен гомеоморфный графу $K_{2,3}$ подграф основы графа Кэли полугруппы формируемой условиями пункта 2 из Леммы при $n > 1$ для $r = 3$, следовательно, в этом случае граф Кэли соответствующей полугруппы не является внешнепланарным, но при этом допускает обобщенную внешнеплоскую укладку. Для меньших значений $r < 3$ либо $n = 1$ для $r = 3$ запрещенных конфигураций не обнаруживается; таким образом, в каждом из этих случаев граф внешнепланарный и обобщенный внешнепланарный.

Пункт 3.1 из Леммы содержит условия, выполнение которых формирует полугруппу, допускающую обобщенный внешнепланарный граф Кэли, но не допускающую внешнепланарный граф Кэли, так как ее основа содержит изображенный на рис. 6 подграф, гомеоморфный графу $K_{2,3}$. В случае выполнения условий пункта 3.2 из Леммы плоская укладка графа Кэли соответствующей полугруппы относительно множества образующих ее элементов $\{(a;0), (a;b)\}$ оказывается внешнепланарной и, следовательно, обобщенной внешнепланарной.

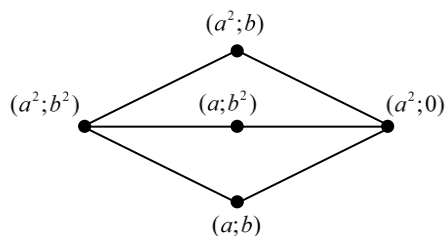


Рис. 6. Подграф основы графа Кэли полугруппы

$$S = \langle a \mid a^3 = a^2 \rangle \times \langle b \mid b^3 = b^2 \rangle^{+0}$$

Fig. 6. Subgraph of the base of the Cayley graph of semigroup

$$S = \langle a \mid a^3 = a^2 \rangle \times \langle b \mid b^3 = b^2 \rangle^{+0}$$

Для полугруппы, удовлетворяющей ограничениям условия 4 из Леммы, при $n = 1$ существует внешнепланарная укладка графа Кэли. В то же время такая укладка существует при $n = 2$ и $r = 1$, но уже при $r > 1$ в основе графа Кэли относительно минимального множества образующих обнаруживается изображенный на рис. 7 подграф, гомеоморфный графу G_{11} , следовательно, граф Кэли не является обобщенным внешнепланарным. Более того, изображенный на рис. 8 подграф, гомеоморфный графу G_{11} , обнаруживается и при $n = 3$, когда $r = 1$. Следовательно, в этом случае граф Кэли рассматриваемой полугруппы также не является обобщенным внешнепланарным и тем более внешнепланарным.

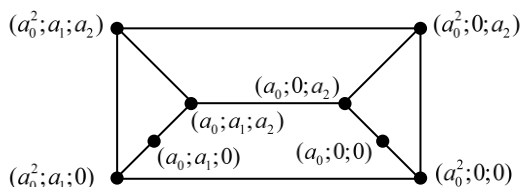


Рис. 7. Подграф основы графа Кэли полугруппы

$$S = \langle a_0 \mid a_0^{r+1} = a_0^r \rangle \times \langle a_1 \mid a_1^2 = a_1 \rangle^{+0} \times \langle a_2 \mid a_2^2 = a_2 \rangle^{+0} \text{ при } r > 1$$

Fig. 7. Subgraph of the base of the Cayley graph of semigroup

$$S = \langle a_0 \mid a_0^{r+1} = a_0^r \rangle \times \langle a_1 \mid a_1^2 = a_1 \rangle^{+0} \times \langle a_2 \mid a_2^2 = a_2 \rangle^{+0} \text{ with } r > 1$$

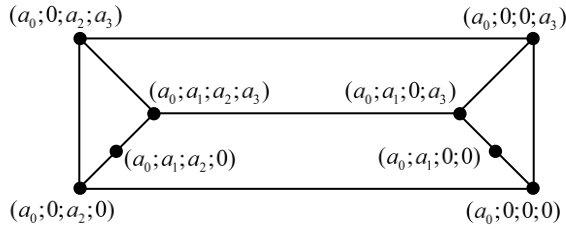


Рис. 8. Подграф основы графа Кэли полугруппы

$$S = \langle a_0 \mid a_0^2 = a_0 \rangle \times \langle a_1 \mid a_1^2 = a_1 \rangle^{+0} \times \langle a_2 \mid a_2^2 = a_2 \rangle^{+0} \times \langle a_3 \mid a_3^2 = a_3 \rangle^{+0}$$

Fig. 8. Subgraph of the base of the Cayley graph of semigroup

$$S = \langle a_0 \mid a_0^2 = a_0 \rangle \times \langle a_1 \mid a_1^2 = a_1 \rangle^{+0} \times \langle a_2 \mid a_2^2 = a_2 \rangle^{+0} \times \langle a_3 \mid a_3^2 = a_3 \rangle^{+0}$$

Что и требовалось доказать.

Заметим, что условия представленных двух теорем различаются только пунктами 1.2, 2 и 3.1. Таким образом, из доказательства этих теорем непосредственно вытекает следующее следствие.

Следствие 1. Конечная полугруппа S , являющаяся произведением неоднородных циклических полугрупп с нулем, допускает обобщенный внешнепланарный граф Кэли, но не допускает внешнепланарный граф Кэли тогда и только тогда, когда выполняется одно из следующих условий:

- 1) $S \cong \langle a \mid a^4 = a^3 \rangle^0 \times \langle b \mid b^4 = b^3 \rangle^0$;
- 2) $S \cong \langle a_0 \mid a_0^4 = a_0^3 \rangle \times \prod_{i=1}^n \langle a_i \mid a_i^3 = a_i^2 \rangle$, где $n > 1$;
- 3) $S \cong \langle a \mid a^3 = a^2 \rangle \times \langle b \mid b^3 = b^2 \rangle^{+0}$.

Заключение

В заключение отметим, что полученный результат открывает перспективы исследования рангов внешнепланарности и рангов обобщенной внешнепланарности многообразий полугрупп с нулем. В работе рассмотрены прямые произведения неоднородных циклических полугрупп с нулем. С помощью понятия основы графа проведено исследование возможности внешнепланарной и обобщенной внешнепланарной укладки графа Кэли полугрупп с нулем. Получены копредставления всех конечных полугрупп с нулем, допускающих обобщенный внешнепланарный граф Кэли, являющихся произведением неоднородных циклических полугрупп с нулем. Подробно рассмотрен случай, когда графы Кэли таких полугрупп оказываются обобщенными внешнепланарными, но не внешнепланарными.

Список источников

1. Харари Ф. Теория графов. М. : Мир, 1973. 300 с.
2. Sedláček J. On a generalization of outerplanar graphs // Časopis Pěst. Mat. 1988. V. 113 (2). P. 213–218. (In Czech).

3. Соломатин Д.В. Исследования полугрупп с планарными графами Кэли: результаты и проблемы // Прикладная дискретная математика. 2021. № 54. С. 5–57. doi: 10.17223/20710410/54/1
4. Мартынов П.О. Конечные свободные коммутативные моноиды, допускающие обобщенно внешнепланарные графы Кэли // Вестник Омского университета. 2015. № 4. С. 6–9.

References

1. Harary F. (1994) *Graph Theory. Advanced Book Program Series*. Boulder: Westview Press.
2. Sedláček J. (1988) O jednom zobecnění vnějškově rovinných grafů [On a generalization of outerplanar graphs]. *Časopis pro pěstování matematiky*. 113(2). pp. 213–218.
3. Solomatin D.V. (2021) Issledovaniya polugrupp s planarnymi grafami Keli: rezul'taty i problemy [Researches of semigroups with planar Cayley graphs: results and problems]. *Prikladnaya diskretnaya matematika*. 54. pp. 5–57. DOI: 10.17223/20710410/54/1.
4. Martynov P.O. (2015) Konechnyye svobodnyye kommutativnyye monoidy, dopuskayushchiye obobshchenno vneshneplanarnyye grafy Keli [Finite free commutative monoids admitting generalized outerplanar Cayley graphs]. *Vestnik Omskogo Universiteta – Herald of Omsk University*. 4. pp. 6–9.

Сведения об авторе:

Соломатин Денис Владимирович – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математики и методики обучения математике Омского государственного педагогического университета (Омск, Россия). E-mail: solomatin_dv@omgpu.ru, denis_2001j@bk.ru

Information about the author:

Solomatin Denis V. (Docent, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Department of Mathematics and Mathematics Teaching Methods, Omsk State Pedagogical University, Omsk, Russian Federation). E-mail: solomatin_dv@omgpu.ru, denis_2001j@bk.ru

Статья поступила в редакцию 17.11.2023; принята к публикации 05.08.2024

The article was submitted 17.11.2023; accepted for publication 05.08.2024

МЕХАНИКА

MECHANICS

Научная статья

УДК 532.593+536.711

doi: 10.17223/19988621/90/5

**Малопараметрическое уравнение состояния графита
для описания поведения сплошных и пористых образцов
в ударных волнах и волнах разгрузки****Румия Катдусовна Бельхеева***Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия,
rimbel@academ.org, rumia@post.nsu.ru*

Аннотация. Построено малопараметрическое уравнение состояния, определены его параметры, позволяющие описывать поведение графита для широкого диапазона плотностей и температур. Смесь графита с металлами и пористый графит рассматриваются как простые термодинамически равновесные смеси. Для коэффициента Грюнайзена используется логарифмическая зависимость от плотности. Рассчитанные с использованием этой модели ударные адиабаты для смесей графита с металлами и для образцов графита с различными начальными пористостями, кривые повторного сжатия и изоэнтропы разгрузки оказываются близкими к имеющимся экспериментальным данным.

Ключевые слова: ударная адиабата, изоэнтропа разгрузки, термодинамическое равновесие, однотемпературное приближение, односкоростное приближение, коэффициент Грюнайзена

Для цитирования: Бельхеева Р.К. Малопараметрическое уравнение состояния графита для описания поведения сплошных и пористых образцов в ударных волнах и волнах разгрузки // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2024. № 90. С. 50–63. doi: 10.17223/19988621/90/5

Original article

**Low-parametric equation of state for graphite describing solid
and porous samples under shock and unloading waves****Rumiya K. Bel'kheeva***Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russian Federation,
rimbel@academ.org, rumia@post.nsu.ru*

Abstract. This study is aimed to obtain the parameters of the graphite equation of state represented as the Mie–Grüneisen equation of state. Graphite with metals and the porous

graphite are considered as simple thermodynamically equilibrium mixtures. The equilibrium state is determined by the conditions of equal pressure, temperature, and velocity of the components in the mixture. Thus, the motion of the multicomponent medium can be described as the motion of a continuum with a special equation of state that takes into account the properties of the mixture components and their concentration, which significantly reduces the number of equations. For the Grüneisen parameter, a logarithmic dependence on density is used, which adequately describes the variation in the Grüneisen parameter for both normal and anomalous behavior of shock adiabats.

The increasing scope of the equation of state is a result of comparing experimental data with calculations for the following: 1) shock-wave loading of porous materials to cover the range of higher temperatures; 2) double compression of the samples to cover the range of increased densities; 3) isentropic expansion of samples to cover the range of low densities; and 4) sound velocities, which characterize the compressibility of matter, slope of the Poisson adiabat on the shock adiabat, and propagation velocity of the weak shock waves and unloading waves through the compressed matter.

The comprehensive analysis confirms that the proposed model of the equation of state for graphite is applicable to practical applications.

Keywords: shock adiabat, unloading isentrope, thermodynamic equilibrium, one-temperature approximation, one-velocity approximation, Grüneisen parameter

For citation: Bel'kheeva, R.K. (2024) Low-parametric equation of state for graphite describing solid and porous samples under shock and unloading waves. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 90. pp. 50–63. doi: 10.17223/19988621/90/5

Введение

Ни одну современную отрасль невозможно представить без углеродных материалов. Углерод используется в ракетостроении, авиационной и химической промышленности, металлургии, дорожном строительстве, ювелирном деле. Важнейшей отраслью промышленного производства является черная металлургия, в которой углерод – один из незаменимых компонентов при производстве чугунов, сталей и сплавов. С изменением доли углерода в сплавах с железом значительно меняются свойства стали, содержание углерода влияет на твердость, прочность, пластичность, вязкость.

Для того чтобы описывать поведение смесей и сплавов, содержащих углерод, и изучать влияние углеродных добавок на их свойства, необходимо иметь уравнение состояния углерода, достоверно описывающее поведение самого углерода. Углерод принимает различные формы – аллотропные модификации – кристаллические, аморфные и кластерные. Кристаллические модификации углерода существуют в виде структур с различными правильными решетками атомного типа, это алмаз, графен, графит, карбин, фуллерен, углеродное волокно и др. Алмаз и графит являются наиболее исследованными кристаллическими модификациями углерода. Аморфные модификации углерода – кокс, бурый и каменный уголь, сажа – содержат разупорядоченную структуру монокристаллического графита и всегда включают в себя некоторую долю примесей. Цель данной работы – получение параметров уравнения состояния графита, при этом не будет производиться детализация разновидностей графита.

Математическая модель уравнения состояния пористой смеси

Потребности современной практики – получение материалов с заданными свойствами, динамическое компактирование веществ и другие взрывные технологии – обуславливают появление новых моделей уравнения состояния. Уравнения состояния веществ служат для описания поведения материалов и используются для замыкания систем уравнений движения при математическом моделировании различных процессов. Наиболее часто при построении уравнений состояния используются данные по ударному сжатию конденсированных веществ. Для того чтобы расширить область применения уравнений состояния, дополнительно используют экспериментальные данные по ударно-волновому нагружению пористых материалов, двукратному сжатию образцов, скоростям звука и изоэнтропическому расширению образцов. Совокупное использование всех этих данных позволяет построить уравнение состояния вещества, которое в полной мере способно описать его поведение.

При построении уравнения состояния используются упрощенные модели, которые описывают основные характеристики изучаемого процесса или явления. Уравнения состояния функционально связывают термодинамические переменные – давление, плотность и температуру (или энергию), а параметры уравнения состояния определяют с помощью экспериментальных данных. При математическом моделировании ударно-волновых явлений для описания поведения конденсированных веществ чаще всего используется уравнение состояния в форме уравнения Ми–Грюнайзена

$$P = P_X + P_T. \quad (1)$$

Для упругой составляющей давления используется уравнение Тета $P_X = A[(\rho/\rho_0)^n - 1]$, тепловая составляющая давления задается соотношением $P_T = \gamma \rho E_T$. Здесь ρ – плотность среды, ρ_0 – параметр уравнения состояния (в случае конденсированного вещества это его плотность при нормальных условиях), A , n – константы, характеризующие вещество, γ – коэффициент Грюнайзена, E_T – тепловая энергия. Использование единственной подгоночной константы n – показателя сжимаемости – делает это уравнение простым в использовании, а связь между давлением и плотностью – наглядной. Второй параметр – коэффициент сжимаемости вещества A – задается зависимостью $A = c_0^2 \rho_0/n$, где c_0 – объемная скорость звука при нормальных условиях.

Внутренняя энергия также представляется в виде суммы двух составляющих:

$$E = E_X + E_T. \quad (2)$$

Упругие слагаемые давления и энергии P_X и E_X связаны зависимостью

$$E_X = \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{P_X - \gamma \rho c_v T_0}{\rho^2} d\rho, \text{ тепловой вклад во внутреннюю энергию задается соотношением}$$

$E_T = c_v(T - T_0)$, где c_v – удельная теплоемкость, T – температура, T_0 – нормальная температура.

При описании тепловой части давления P_T особенное внимание уделяется коэффициенту Грюнайзена. Считается, что величина γ уменьшается с ростом интенсивности ударных волн, поэтому, как правило, в большинстве работ, посвященных ударно-волновому нагружению, коэффициент Грюнайзена описывается зависимостью $\gamma \sim \rho^{-l}$ ($l > 0$). Применение этой формулы при математическом

моделировании экспериментов по ударно-волновому нагружению сплошных материалов при очень высоких давлениях не дает приемлемого описания. При расчете ударных адиабат для материалов с высокой пористостью использование этой зависимости приводит к тому, что коэффициент Грюнайзена возрастает с ростом интенсивности ударной волны. Это вызвано тем, что конечная плотность ударно-сжатого высокопористого вещества оказывается меньше начальной нормальной плотности, отношение ρ_0/ρ становится большим единицы ($\rho_0/\rho > 1$). Такое поведение коэффициента Грюнайзена противоречит наблюдениям. В работах [1–3] отмечается необходимость учета влияния на коэффициент Грюнайзена и температуры, и плотности при значительных сжатиях. В [4] приведен способ описания зависимости коэффициента Грюнайзена от температуры. Логарифмическая зависимость коэффициента Грюнайзена от относительной плотности

$$\gamma = \gamma_0 \left(\frac{\rho_0}{\rho} \right)^{\frac{\ln \frac{\rho}{\rho_0}}{\rho_0}}, \quad (3)$$

предложенная в [5], позволяет обойти затруднения, вызванные не отвечающему требуемому поведению коэффициента Грюнайзена. В этом случае коэффициент Грюнайзена будет уменьшаться как с увеличением плотности вещества в ударной волне, так и с ее уменьшением при аномальном поведении ударных адиабат, так как знак логарифма зависит от величины аргумента, и при $\rho_0/\rho > 1$ показатель становится отрицательным.

Для описания тепловой части давления при использовании выражения (3) подбирается только один подгоночный внешний параметр γ_0 . В этом случае уравнение состояния (1) приводится к виду:

$$P = A \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^n - 1 \right] + \gamma_0 \rho_0 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{1 - \ln \frac{\rho}{\rho_0}} c_v (T - T_0), \quad (4)$$

в котором используются только два внешних параметра n и γ_0 . Как правило, малопараметрические уравнения состояния имеют более узкий диапазон применимости, но более наглядно демонстрируют физические результаты. В данном случае использование для коэффициента Грюнайзена зависимости (3) приводит к увеличению диапазона применимости уравнения состояния (4) как для больших значений давлений, так и для больших значений пористости. Многие предлагаемые в настоящее время уравнения состояния [6–10] характеризуются широким диапазоном применимости и хорошей точностью описания экспериментальных данных. Это достигается за счет привлечения большого количества подгоночных параметров. При этом нахождение численных значений этих параметров представляет собой отдельную сложную вычислительную задачу, которая часто не имеет однозначного решения.

В настоящей работе пористые материалы и пористые многокомпонентные смеси считаются простыми гетерогенными средами. Это означает, что компоненты в смеси не образуют химические связи и не взаимодействуют на атомарном уровне. Поры герметичны и заполнены воздухом. Плавления и выделения газобразных продуктов из конденсированных сред под действием ударной волны не происходит, возможные полиморфные превращения не рассматриваются. За по-

ристость принимается отношение плотности конденсированной среды к плотности пористой среды. Совпадение давлений, температур и массовых скоростей в составляющих смеси является условием термодинамического равновесия. В этом случае возможно гетерогенную среду рассматривать как однородную среду, в уравнении состояния которой учтены вклады составляющих и их концентрации, что многократно сокращает число уравнений в математической модели. Основы построения движения модели гетерогенной среды изложены в работе [11]. В [12, 13] приведен способ описания движения гетерогенной среды как однородной в случае, когда единым образом заданы уравнения состояния компоненты и смеси. В [14] показано, что уравнения состояния вида (1) применимо для описания поведения воздуха при сильных импульсных нагрузках. В [13] приведены соотношения, с помощью которых параметры уравнения состояния N -компонентной смеси A , c_0 , n , γ_0 вычисляются через соответствующие параметры уравнений состояния и массовые концентрации компонентов для простых многокомпонентных смесей:

$$n = \frac{R_1 R_3}{R_2^2} - 1, \quad A = k A_N - \frac{n R_2}{R_1}, \quad \rho_0 = \frac{1}{R_1} \left(\frac{A}{P + k A_N} \right)^{1/n},$$

$$\gamma_0 = \frac{n}{c_v} (\rho_0 R_1)^{\ln(\rho_0 R_1)} R_4,$$

где

$$R_1 = \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\rho_{i0}} \left(\frac{A_i}{P + k A_N} \right)^{1/n_i}, \quad R_2 = \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\rho_{i0}} \left(\frac{A_i}{P + k A_N} \right)^{1/n_i} \frac{k A_N - A_i}{n_i},$$

$$R_3 = \sum_{i=1}^N \frac{x_i}{\rho_{i0}} \left(\frac{A_i}{P + k A_N} \right)^{1/n_i} (n_i + 1) \left(\frac{k A_N - A_i}{n_i} \right)^2, \quad R_4 = \sum_{i=1}^N \frac{x_i \gamma_{i0} c_{vi}}{n_i} \left(\frac{P + k A_N}{A_i} \right)^{\frac{1}{n_i^2} \ln \frac{A_i}{P + k A_N}}.$$

Здесь $A_1 < \dots < A_N$, в [13] показано, что значение параметра k , равное двум, удовлетворяет условию сходимости для всех компонентов.

Отсюда следует, что, подобрав два параметра – показатель сжимаемости и начальное значение коэффициента Грюнайзена n , γ_0 – для каждого компонента и воспользовавшись выражениями, приведенными выше, можно получить параметры для уравнения состояния типа Ми–Грюнайзена и описать поведение смеси.

Верификация этой модели проводится путем сравнения расчетных ударных адиабат, адиабат двукратного сжатия, скоростей звука, изоэнтроп разгрузки и адиабат для смесей графита с металлами с экспериментальными данными. Уравнения Гюгоньо в случае первоначально невозмущенной покоящейся среды имеют вид:

$$\rho_{00} D = \rho(D - u), \quad P = \rho_{00} Du, \quad E - E_0 = \frac{P}{2} \left(\frac{1}{\rho_{00}} - \frac{1}{\rho} \right), \quad (5)$$

где c_{00} , E_0 – соответственно плотность и внутренняя энергия единицы массы смеси перед фронтом ударной волны; u , P , E – массовая скорость, давление и удельная внутренняя энергия среды за фронтом ударной волны; D – скорость фронта ударной волны. Замыкание системы добавлением к соотношениям (5) уравнений

состояния среды (2), (4) с коэффициентом Грюнайзена (3) и параметрами, приведенными в [13], задает систему уравнений для неизвестных u , D , P , E , c . Значения всех искомых величин можно вычислить, задав значение массовой скорости среды за фронтом ударной волны.

Сравнение расчетных и экспериментальных данных

В таблице приведены значения параметров уравнений состояния материалов, для которых проводились расчеты. Подчеркнем, что во всех расчетах были использованы одни и те же числовые значения параметров при всех значениях пористости.

Параметры уравнений состояния воздуха и графита

Вещества	ρ_{i0} , кг/м ³	A_i , Па	n_i	c_{vi} , кДж/(кг·К)	γ_{i0}
Воздух	1.3	$0.695 \cdot 10^{-3}$	2.20	0.718	0.16
Графит	$2.265 \cdot 10^3$	$6.141 \cdot 10^9$	6.2	0.710	0.71
Медь	$8.93 \cdot 10^3$	$3.295 \cdot 10^{10}$	4.25	0.382	2.00
Железо	$7.873 \cdot 10^3$	$3.153 \cdot 10^{10}$	4.3	0.465	1.75

На рис. 1, a , b приведены расчетные ударные адиабаты графита в координатах массовая скорость за фронтом ударной волны – скорость фронта ударной волны и относительная плотность – давление за фронтом ударной волны соответственно и данные, полученные на основании экспериментов для образцов пиролитического графита. Здесь c_{T0} – плотность сплошного графита при нормальных условиях.

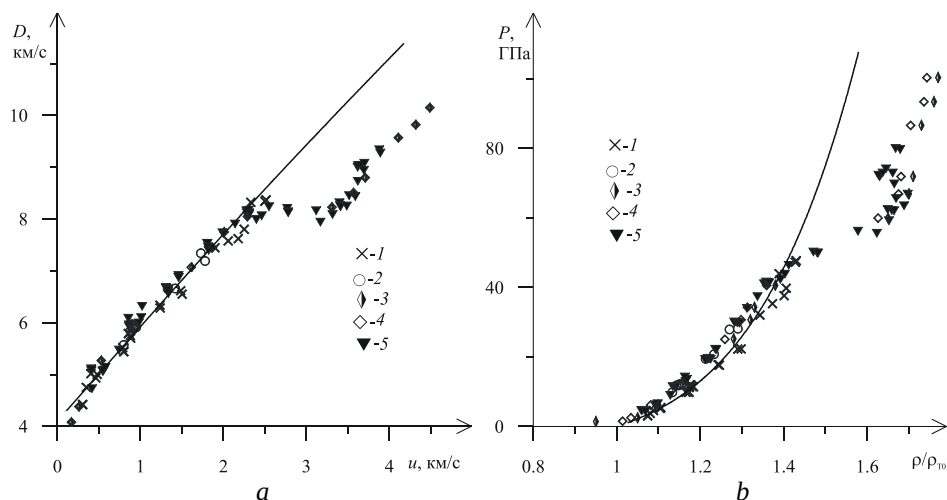


Рис. 1. Ударные адиабаты пиролитического графита в координатах u – D (a) и ρ/ρ_0 – P (b): сплошные кривые – расчетная адиабата; эксперименты: 1 – $m = 1.0$ [15]; 2 – $m = 1.03$ [16]; 3 – $m = 1.013$ [17]; 4 – $m = 1.029$ [17]; 5 – $m = 1.03$ [18]

Fig. 1. Shock adiabats in (a) u – D and (b) ρ/ρ_0 – P coordinates for pyrolytic graphite: solid lines are the calculated results; experimental data are obtained for $m = (1)$ 1.0 [15]; (2) 1.03 [16]; (3) 1.013 [17]; (4) 1.029 [17]; and (5) 1.03 [18]

Расчеты проводились для сплошного графита. Плотность образцов пиролитического графита была близка к начальной плотности графита при нормальных условиях, пористость образцов в эксперименте колебалась в пределах 1.0–1.03. Пиролитический графит получают осаждением атомов углерода из газовой фазы или разложением материалов, содержащих углерод. Его плотность зависит от способа пиролиза. Особенность пирографита в том, что он является практически беспористым материалом и обладает уникальными свойствами: в нем нет примесей, поэтому его свойства зависят только от структурных перестроек; у него однородная кристаллическая структура; он обладает резкой анизотропией тепловых свойств. Экспериментальные данные приведены до значений массовой скорости за фронтом ударной волны менее 2.5 км/с, так как примерно от значений $u \sim 2$ км/с начинается фазовый переход графита в алмаз и ход адиабаты изменяется.

На рис. 2, *a*, *b* приведены расчетные ударные адиабаты графита в координатах массовая скорость за фронтом ударной волны – скорость фронта ударной волны и относительная плотность – давление за фронтом ударной волны соответственно и данные, полученные на основании экспериментов для образцов природного графита.

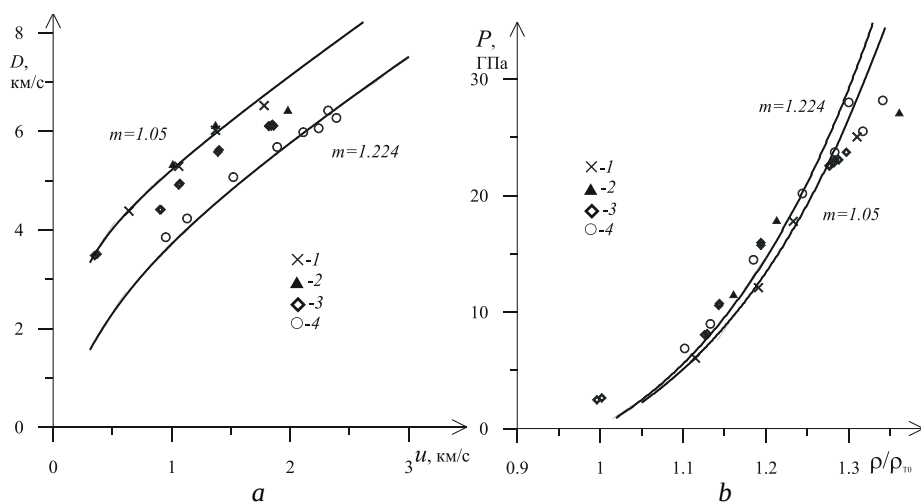


Рис. 2. Ударные адиабаты природного графита в координатах u – D (*a*) и ρ/ρ_0 – P (*b*): сплошные кривые – расчетные адиабаты; эксперименты 1 – $m = 1.05$ [19]; 2 – $m = 1.06$ [20]; 3 – $m = 1.116$ [20]; 4 – $m = 1.205$ [20]

Fig. 2. Shock adiabats in (*a*) u – D and (*b*) ρ/ρ_0 – P coordinates for natural graphite: solid lines are the calculated results; experimental data are obtained for $m = (1)$ 1.05 [19]; (2) 1.06 [20]; (3) 1.116 [20]; and (4) 1.205 [20]

Расчеты проведены для значений пористости $m = 1$ и $m = 1.224$, пористость образцов графита в экспериментах колебалась в диапазоне $m = 1.0 \div 1.224$. Данные по экспериментам приведены до начала излома на адиабате графита. Разброс значений экспериментальных данных в опытах по нагружению различных видов природного графита объясняют влиянием структуры использовавшихся в эксперименте образцов графита и наличием примесей. Однако одни и те же значения параметров уравнения состояния дают хорошее качественное и количественное

соответствие расчетных и экспериментальных данных в широком диапазоне давлений, и это показывает, что приведенная в работе математическая модель уравнения состояния очень хорошо описывает поведение образцов графита различной структуры в ударной волне. Рядом с расчетными адиабатами указаны значения пористости.

Ударное сжатие пористых тел приводит к сильному разогреву материала, и это дает более полную информацию о термодинамических свойствах вещества при высоких давлениях и температурах. На рис. 3, а, б приведены расчетные ударные адиабаты образцов графита различной пористости в координатах массовая скорость за фронтом ударной волны – скорость фронта ударной волны и относительная плотность – давление за фронтом ударной волны соответственно и данные экспериментов для пористого графита до излома на адиабатах. Рядом с расчетными адиабатами поставлены значения пористости, значки – данные экспериментов.

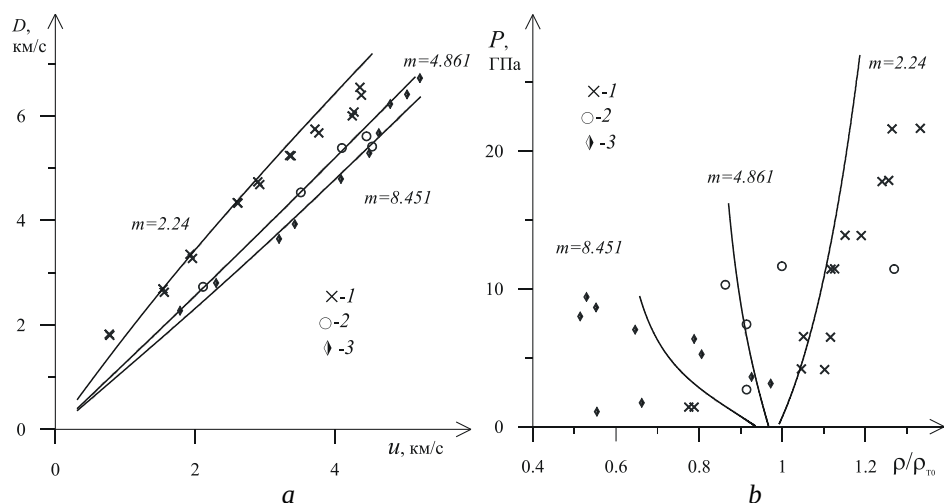


Рис. 3. Ударные адиабаты пористого графита в координатах u – D (а) и ρ/ρ_0 – P (б): сплошные кривые – расчетные адиабаты; эксперименты 1 – $m = 2.24$ [18]; 2 – $m = 4.861$ [18]; 3 – $m = 8.451$ [3]

Fig. 3. Shock adiabats in (a) u – D and (b) ρ/ρ_0 – P coordinates for porous graphite: solid lines are the calculated results; experimental data are obtained for $m = (1) 2.24$ [18]; (2) 4.861 [18]; and (3) 8.451 [3]

При проведении ударно-волновых экспериментов наиболее точными и надежными являются измерения скорости ударной волны, которую наиболее легко измерить, и массовой скорости вещества за фронтом ударной волны. Остальные параметры ударной волны находятся подстановкой массовой скорости и скорости ударной волны в уравнения Гюгоню (5). Поэтому наиболее достоверными являются сравнения расчетных и экспериментальных данных на рис. 1, а, 2, а, 3, а, и эти сравнения позволяют сделать вывод о хорошем качественном и количественном соответствии расчетов и экспериментов.

Для полноты исследования проведено сравнение значений скоростей звука, полученных с помощью данной модели, и приведенных в литературе. Скорость звука при используемом в работе коэффициенте Грюнайзена описывается зави-

симостью $C_{s2} = \frac{1}{\rho} \left[n(P_x + A) + \left(\gamma + 1 + 2 \ln \frac{\rho_0}{\rho} \right) P_T \right]$. Рисунок 4 демонстрирует удо-

влетворительное соответствие расчетных кривых и экспериментальных данных для скоростей звука в координатах массовая скорость за фронтом ударной волны – скорость звука на ударной адиабате. Приведенные данные наглядно показывают понижение скорости звука при увеличении пористости материала.

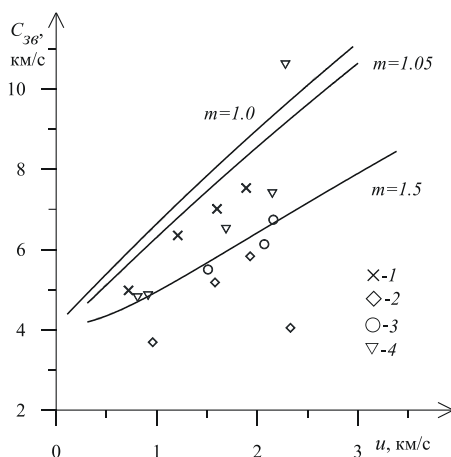


Рис. 4. Скорость звука на ударных адиабатах в сплошных образцах графита в координатах $u-C_{зв}$: сплошные линии – расчетные скорости звука; эксперименты: 1 – $m = 1.16 \div 1.19$ [21]; 2–4 $m = 1.024 \div 1.469$ [19]

Fig. 4. Speed of sound on the shock waves in $u-C_{зв}$ coordinates for solid graphite samples: solid lines are the calculated results; experimental data are obtained for $m = (1) 1.16 \div 1.19$ [21] and (2) – (4) $1.024 \div 1.469$ [19]

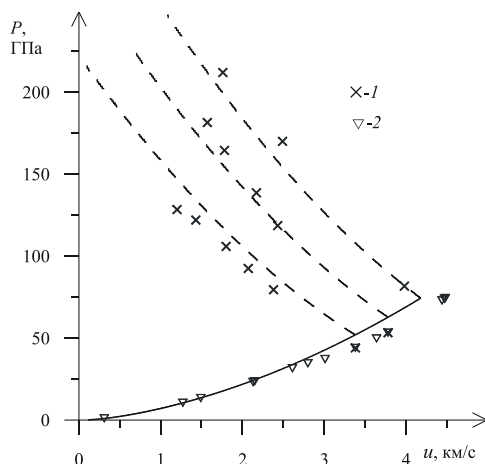


Рис. 5. Ударная адиабата и адиабаты двукратного сжатия в координатах $u-P$ в образцах графита с пористостью 1.211; сплошная линия – ударная адиабата, пунктирные – двукратное сжатие; экспериментальные данные: 1 – адиабаты двойного сжатия [17]; 2 – ударная адиабата однократного нагружения [17]

Fig. 5. Shock adiabat and double shock adiabats in $u-P$ coordinates for porous graphite samples with a porosity of 1.211, where the solid line indicates a shock wave, and dashed lines indicate double compression adiabats; experimental data are from [17]: (1) double compression adiabats and (2) a single-load adiabat

Для анализа того, как предлагаемая модель уравнения состояния описывает термодинамические свойства вещества в интервале больших значений плотностей, на рис. 5 проводится сравнение расчетных и опытных результатов при двукратном ударно-волновом сжатии образцов графита с пористостью $m = 1.211$. Отклонение расчетных адиабат от экспериментальных данных объясняется наличием фазового перехода. На рисунке приведены результаты измерений при однократном нагружении образцов графита. Наблюдается совпадение расчетов и экспериментов до излома на экспериментальной адиабате, а повторное сжатие в опытах производится из области, содержащей алмаз, и это вызывает отклонение расчетных адиабат от экспериментов. В расчетах не рассматривается наличие фазового перехода.

Для того чтобы верифицировать адекватность описания предлагаемой моделью уравнения состояния поведения среды в области пониженных плотностей, на рис. 6 проведено сравнение расчетных и экспериментальных изоэнтроп разгрузки материала, подвергнутого ударно-волновому сжатию. Приведены две расчетные ударные адиабаты для пористостей $m = 1.03$ и $m = 1.211$, экспериментальные точки из опытов по ударно-волновому нагружению образцов пористого графита для $m = 1.03$ (крестики) и $m = 1.211$ (треугольники), изоэнтропы разгрузки. Экспериментальные данные для изоэнтроп обозначены квадратами, в которых стоят цифры. Расчетные изоэнтропы проведены прерывистыми линиями, рядом с кривыми проставлены цифры, корреспондирующие с экспериментальными данными. Наблюдается совпадение расчетных и экспериментальных адиабат до излома на опытных адиабатах. Расчетная и экспериментальная изоэнтропы с номером 1 совпадают, так как разгрузка идет из состояния на адиабате до начала фазового перехода. Расчетные изоэнтропы с номерами 2–4 отклоняются от соответствующих экспериментальных данных, поскольку разгрузка при расчетах идет из положений на адиабате графита, а в экспериментах – из положений на адиабате, соответствующих наличию алмаза в материале.

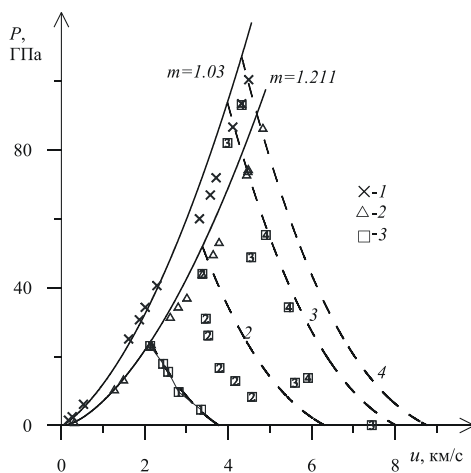


Рис. 6. Ударная адиабата и изоэнтропы разгрузки пористых образцов графита в координатах u - P ; экспериментальные данные: 1–3 [17]

Fig. 6. Shock adiabat and unloading isentropes in u - P coordinates for porous graphite samples; (1) – (3) are the experimental data from [17]

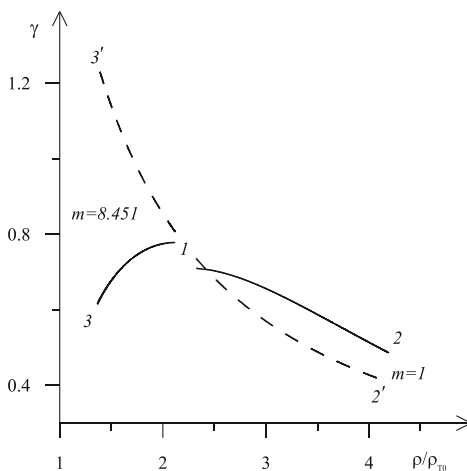


Рис. 7. Зависимость коэффициента Грюнайзена от плотности

Fig. 7. The Grüneisen parameter as a function of density

В [22] зависимость коэффициента Грюнайзена от плотности для графита задается линейной зависимостью $c \gamma = 1.71 \text{ г/см}^3$. На рис. 7 проводится сравнение поведения коэффициента Грюнайзена, заданного этим соотношением (штриховые линии), и зависимости (3) (сплошные линии). Для сплошных образцов коэффициент Грюнайзена уменьшается из начального положения 1 до положений 2 и 2', для пористости $m = 8.451$ используемая в настоящей работе зависимость (3) при-

водит к уменьшению коэффициента Грюнайзена до значения в точке 3, а соотношение, используемое в [22], ведет к увеличению коэффициента Грюнайзена до значения в точке 3'.

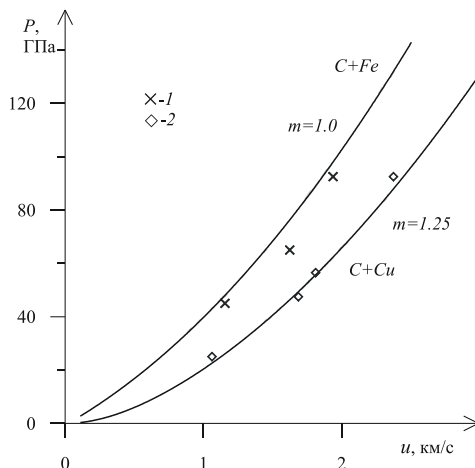


Рис. 8. Ударные адиабаты смесей графита и металлов в координатах u – P ; экспериментальные данные: 1, 2 [23]

Fig. 8. Shock adiabats in u – P coordinates for graphite–metals mixtures; (1) – (2) are the experimental data from [23]

На рис. 8 проводится сравнение расчетных и экспериментальных адиабат для сплошного образца смеси графит–железо и пористого ($m = 1.25$) образца графит–медь. В экспериментах использовали технически чистый графит и порошки меди и железа. Наблюдается хорошее соответствие расчетных и экспериментальных данных.

Вывод

Таким образом, сравнение расчетов, моделирующих ударно-волновое сжатие, двукратное сжатие, изэнтропическое расширение образцов графита и образцов смесей графита с металлами, скоростей звука для образцов графита различной пористости с экспериментами свидетельствует о хорошем качественном и количественном описании опытов моделью. Проведенный всесторонний анализ позволяет сделать вывод о применимости предлагаемой модели уравнения состояния графита.

Список источников

1. Ашкофт Н., Мермин Н. Физика твердого тела : пер. с англ. М. : Мир, 1979. Т. 2. 422 с.
2. Белащенко Д.К., Воротягин А.В., Гельчинский Б.Р. Компьютерное моделирование алюминия в области высоких давлений // Теплофизика высоких температур. 2011. Т. 49, № 5. С. 676–686. doi: 10.1134/S0018151X11050038
3. Молодец А.М., Молодец М.А. Температурная зависимость функции Грюнайзена химических элементов // Химическая физика. 1997. Т. 16, № 5. С. 122–126.

4. Кинеловский С.А., Маевский К.К. Модель поведения пористых смесей, включающих в свой состав железо, при ударно-волновом нагружении // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2014. Т. 29, № 3. С. 82–93.
5. Бельхеева Р.К. Модель коэффициента Грюнайзена для широкого диапазона плотностей на примере меди // Теплофизика высоких температур. 2021. Т. 59, № 4. С. 514–519. doi: 10.1134/S0018151X21040040
6. Гордеев Д.Г., Гударенко Л.Ф., Каякин А.А. и др. Полуэмпирическая модель уравнения состояния металлов с эффективным учетом ионизации. Ч. 2. Уравнение состояния алюминия // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2010. № 3. С. 26–34.
7. Гордеев Д.Г., Гударенко Л.Ф., Каякин А.А., Куделькин В.Г. Модель уравнения состояния металлов с эффективным учетом ионизации. Уравнения состояния Ta, W, Al, Be // Физика горения и взрыва. 2013. Т. 49, № 1. С. 106–120.
8. Ломоносов И.В., Фортова С.В. Широкодиапазонные полуэмпирические уравнения состояния вещества для численного моделирования высокоэнергетических процессов // Теплофизика высоких температур. 2017. Т. 55, № 4. С. 596–626. doi: 10.1134/S0018151X17040113
9. Khishchenko K.V., Fortov V.E., Lomonosov I.V. Multiphase Equation of State for Carbon over Wide Range of Temperatures and Pressures // Int. J. Thermophys. 2005. V. 26 (2). P. 479–491.
10. Lomonosov I.V. Multi-phase Equation of State for Aluminum // Laser and Particle Beams. 2007. V. 25. P. 567–584.
11. Нигматулин Р.И. Основы механики гетерогенных сред. М. : Наука, 1978. 336 с.
12. Бельхеева Р.К. Построение уравнения состояния пористой смеси конденсированных компонентов // Прикладная механика и техническая физика. 2012. Т. 53, № 4. С. 3–15.
13. Бельхеева Р.К. Уравнение состояния сильнопористого вещества // Теплофизика высоких температур. 2015. Т. 53, № 3. С. 367–377. doi: 10.7868/S0040364415020052
14. Бельхеева Р.К. Термодинамическое уравнение состояния для описания поведения пористой смеси при больших давлениях и температурах // Прикладная механика и техническая физика. 2007. Т. 48, № 5. С. 53–60.
15. Coleburn N.L. The compressibility of pyrolytic graphite // J. Chem. Phys. 1964. V. 40 (73). P. 71–77. doi: 10.1063/1.1729548
16. Doran D.G. Hugoniot equation of state of pyrolytic graphite to 300 kbars // J. Appl. Phys. 1963. V. 34. P. 844–850. doi: 10.1063/1.1724896
17. Трунин Р.Ф., Гударенко Л.Ф., Жерноклетов М.В., Симаков Г.В. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ // под ред. Р.Ф. Трунина. Саратов : РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2006.
18. LASL Shock Hugoniot Data / S.P. Marsh (ed.). Berkeley : University of California Press, 1980.
19. Gust W.H. Phase transition and shock-compression parameters to 120 GPa for three types of graphite and amorphous carbon // Physical Review B. 1980. V. 22 (10). P. 4744–4756. doi: 10.1103/PhysRevB.22.4744
20. McQueen R.G., Marsh S.P. Hugoniots of graphytes of various initial densities and the equation of state of carbon // Behavior of dense media under high dynamic pressures : Proc. of the Symp. on the Behavior of Dense Media under High Dynamic Pressures, Sept. 1967. Paris ; New York : Gordon and Breach, 1968. P. 207–216.
21. Жук А.З., Иванов А.В., Каннель Г.И. // Исследование кинетики фазового перехода графит–алмаз // Теплофизика высоких температур. 1991. Т. 29, № 3. С. 486–493.
22. Boade R.R. Shock compression of Foamed Graphite // J. Appl. Phys. 1968. V. 39 (3). P. 1609–1617. doi: 10.1063/1.1656403
23. Ставер А.М. Исследование термодинамики фазового перехода углерода в алмаз при ударном нагружении смесей углерод + металл // Детонация. Критические явления. Физико-химические превращения в ударных волнах. Черноголовка : ОИХФ, 1978. С. 131–136.

References

1. Ashcroft N.W. Mermin N.D. (1976) *Solid State Physics*. Volume 2. New York: Berkeley University.
2. Belashchenko D.K., Vorotyagin A.V., Gelchinskiy B.R. (2011) Komp'yuternoe modelirovanie alyuminiya v oblasti vysokikh davleniy [Computer simulation of aluminum in the high-pressure range]. *Teplofizika vysokikh temperatur – High Temperature*. 49(5). pp. 656–666. doi: 10.1134/S0018151X11050038
3. Molodets A.M., Molodets M.A. (1997) Temperaturnaya zavisimost' funktsii Gryunayzena khimicheskikh elementov [Temperature dependence of the Grüneisen parameter for chemical elements]. *Khimicheskaya fizika – Russian Journal of Physical Chemistry B*. 16(5). pp. 122–126.
4. Kinelovskiy S.A., Maevskiy K.K. (2014) Model' povedeniya poristyykh smesey, vklyuchayushchikh v svoj sostav zhelezo, pri udarno-volnovom nagruzhenii [A behavior model for porous iron containing mixtures upon shock wave loading]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 29(3). pp. 82–93.
5. Bel'kheeva R.K. (2022) Model' koeffitsienta Gryunayzena dlya shirokogo diapazona plotnostey na primere medi [Model of the Grüneisen coefficient for a wide range of densities on the example of copper]. *Teplofizika vysokikh temperatur – High Temperature*. 60(1). pp. 26–29. doi: 10.1134/S0018151X21040040
6. Gordeev D.G., Gudarenko L.F., Kayakin A.A., Kudel'kin V.E. (2010) Poluempiricheskaya model' uravneniya sostoyaniya metallov s effektivnym uchetom ionizatsii. Chast' 2. Uravnenie sostoyaniya alyuminiya [Semi-empirical model of the equation of state of metals with effective account of ionization. Part 2: Equation of state of aluminum]. *Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Seriya: Teoreticheskaya i prikladnaya fizika – VANT. Theoretical and Applied Physics*. 3. pp. 26–34.
7. Gordeev D.G., Gudarenko L.F., Kayakin A.A., Kudelkin V.G. (2013) Equation of state model for metals with ionization effectively taken into account. Equation of state of tantalum, tungsten, aluminum, and beryllium. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 49(1). pp. 92–104. doi: 10.1134/s0010508213010103
8. Lomonosov I.V., Fortova S.V. (2017) Shirokodiapazonnye poluempiricheskie uravneniya sostoyaniya veshchestva dlya chislennogo modelirovaniya vysokoenergeticheskikh protsessov [Wide-range semiempirical equations of state of matter for numerical simulation on high-energy processes]. *Teplofizika vysokikh temperatur – High Temperature*. 55(4). pp. 596–626. doi: 10.1134/S0018151X17040113
9. Khishchenko K.V., Fortov V.E., Lomonosov I.V. (2005) Multiphase equation of state for carbon over wide range of temperatures and pressures. *International Journal of Thermophysics*. 26(2). pp. 479–491. doi: 10.1007/s10765-005-4510-0
10. Lomonosov I.V. (2007) Multi-phase equation of state for aluminum. *Laser and Particle Beams*. 25(4). pp. 567–584. doi: 10.1017/S0263034607000687
11. Nigmatulin R.I. (1978) *Osnovy mekhaniki geterogennykh sred* [Fundamentals of mechanics of heterogeneous media]. Moscow: Nauka.
12. Bel'kheeva R.K. (2012) Postroenie uravneniya sostoyaniya poristoy smesi kondensirovannykh komponentov [Construction of the equation of state of a porous mixture of condensed species]. *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika – Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. 53(4). pp. 3–15. doi: 10.1134/S0021894412040013
13. Bel'kheeva R.K. (2015) Uravnenie sostoyaniya sil'noporistogo veshchestva [Equation of state for a highly porous material]. *Teplofizika vysokikh temperatur – High Temperature*. 53(3). pp. 367–377. doi: 10.7868/S0040364415020052
14. Bel'kheeva R.K. (2007) Termodinamicheskoe uravnenie sostoyaniya dlya opisaniya povedeniya poristoy smesi pri bol'shikh davleniyakh i temperaturakh [Thermodynamic equation of state of a porous mixture at high pressures and temperatures].

- tion of state used to describe the behavior of a porous mixture under high pressures and temperatures]. *Prikladnaya mekhanika i tekhnicheskaya fizika – Journal of Applied Mechanics and Technical Physics*. 48(5). pp. 53–60. doi: 10.1007/s10808-007-0085-9
15. Coleburn N.L. (1964) The compressibility of pyrolytic graphite. *Journal of Chemical Physics*. 40(73). pp. 71–77. doi: 10.1063/1.1729548
 16. Doran D.G. (1963) Hugoniot equation of state of pyrolytic graphite to 300 kbars. *Journal of Applied Physics*. 34. pp. 844–850. doi: 10.1063/1.1724896
 17. Trunin R.F., Gudarenko L.F., Zhernokletov M.V., Simakov G.V. (2006) *Eksperimental'nye dannye po udarno-volnovomu szhatiye i adiabaticheskomu rasshireniyu kondensirovannykh veshchestv* [Experimental data on shock-wave compression and adiabatic expansion of condensed materials]. Sarov: Izdatel'stvo rossiyskogo federal'nogo yadernogo tsentra – VNIIEF.
 18. Marsh S.P. (1980) *LASL Shock Hugoniot Data*. Berkeley: University of California Press.
 19. Gust W.H. (1980) Phase transition and shock-compression parameters to 120 GPa for three types of graphite and amorphous carbon. *Physical Review B*. 22(10). pp. 4744–4756. doi: 10.1103/PhysRevB.22.4744
 20. McQueen R.G., Marsh S.P. (1967) Hugoniots of graphites of various initial densities and the equation of state of carbon. In: *Symposium on the 'Behavior of Dense Media under High Dynamic Pressure*. Paris.
 21. Zhuk A.Z., Ivanov A.V., Kannel G.I. (1991) Issledovanie kinetiki fazovogo perekhoda grafit –almaz [Study of the kinetics of graphite-diamond phase transition]. *Teplofizika vysokikh temperatur – High Temperature*. 29(3). pp. 486–493.
 22. Boade R.R. (1968) Shock compression of foamed graphite. *Journal of Applied Physics*. 39(3). pp. 1609–1617. doi: 10.1063/1.1656403
 23. Staver A.M. (1978) Issledovanie termodinamiki fazovogo perekhoda ugleroda valmaz pri udarnom nagruzhении smesey uglerod + metall. V kn.: *Detonatsiya. Kriticheskie yavleniya. Fiziko-khimicheskie prevrashcheniya v udarnykh volnakh* [Investigation of thermodynamics of carbon-to-diamond phase transition under shock loading of carbon + metal mixtures. In: *Detonation. Critical Phenomena. Physical and Chemical Transformations in Shock Waves*]. Chernogolovka. pp. 131–136.

Сведения об авторе:

Бельхеева Румия Катдусовна – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математического моделирования механико-математического факультета Новосибирского государственного университета (Новосибирск, Россия). E-mail: rimbel@academ.org, rumia@post.nsu.ru

Information about the author:

Bel'kheeva Rumiya K. (Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor, Novosibirsk State University, Novosibirsk, Russian Federation). E-mail: rimbel@academ.org, rumia@post.nsu.ru

Статья поступила в редакцию 10.05.2023; принята к публикации 05.08.2024

The article was submitted 10.05.2023; accepted for publication 05.08.2024

Научная статья

УДК 51-74, 531.3

doi: 10.17223/19988621/90/6

Высокоточные представления Ван-дер-Ваальсовских взаимодействий

Владислав Иванович Бородин¹, Михаил Алексеевич Бубенчиков²,
Алексей Михайлович Бубенчиков³, Дмитрий Владимирович Мамонтов⁴

¹ ООО «Газпром трансгаз Томск», Томск, Россия

^{1, 2, 3, 4} Томский государственный университет, Томск, Россия

¹ borodingttgazprom@mail.ru

² michael121@mail.ru

³ bubenchikov_am@mail.ru

⁴ orevaore@mail.ru

Аннотация. На основе разработанного высокоточного метода расчета динамики каркасных молекул показано, что характер тройных столкновений фуллеренов зависит от энергии вращений сталкивающихся молекулярных объектов. Показано также, что такие столкновения часто приводят к образованию стабильно существующей кинематической пары. В этой паре взаимодействующие объекты перемещаются симметрично по квазиплоским орбитам вокруг центра сформировавшегося дуэта.

Ключевые слова: численное моделирование, молекулярная динамика, фуллерены, нанометериалы

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке гранта РНФ № 19-71-10049.

Для цитирования: Бородин В.И., Бубенчиков М.А., Бубенчиков А.М., Мамонтов М.А. Высокоточные представления Ван-дер-Ваальсовских взаимодействий // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2024. № 90. С. 64–77. doi: 10.17223/19988621/90/6

Original article

Highly accurate representations of van der Waals interactions

Vladislav I. Borodin¹, Mikhail A. Bubenchikov²,
Aleksey M. Bubenchikov³, Dmitriy V. Mamontov⁴

¹ Gazprom Transgaz Tomsk, Tomsk, Russian Federation

^{1, 2, 3, 4} Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation

¹ borodingttgazprom@mail.ru

² michael121@mail.ru

³ *bubenchikov_am@mail.ru*

⁴ *orevaore@mail.ru*

Abstract. This paper considers the interactions between two and three fullerenes using the methods of molecular dynamics. The results show that at a time step of one femto-second, very high calculation accuracy can be achieved regarding the kinematic and energy parameters of the interaction. Thus, the details associated with the symmetry of the relative opposition of molecular objects are revealed, and the features and nature of the transition of two-dimensional motions of interacting objects into three-dimensional interaction of fullerenes are clarified, in particular, the interaction with the formation of a kinematic pair. The role of the initial spin of the fullerenes, which disables the transition of kinematic energy from the reservoir of translational energy into rotational energy, is also identified. This makes the formation of a kinematic pair impossible. In the general case, the triple collision of fullerenes is a complex process, in which, even in the special case of plane approximation, three phases can be distinguished: initial planar motion, multi-sheet spatial interaction of three objects, and a double spiral of interacting molecules with the linear motion of the discarded fullerene.

Keywords: numerical modeling, molecular dynamics, fullerenes, nanomaterials

Acknowledgments: This work was financially supported by the Russian Science Foundation (project No. 19-71-10049).

For citation: Borodin, V.A., Bubenchikov, M.A., Bubenchikov, A.M., Mamontov, D.V. (2024) Highly accurate representations of van der Waals interactions. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 90. pp. 64–77. doi: 10.17223/19988621/90/6

Введение

В настоящее время очень популярными для исследования являются самособирающиеся фуллереновые структуры, в частности мономолекулярные слои из фуллеренов C₆₀, где каждый фуллерен связан с соседними молекулами с помощью ковалентных связей [1]. В работе [2] рассмотрен монослойный фуллерен с квазигексагональной фазой (C₆₀). Полученный 2D-молекулярный кристалл демонстрирует высокую кристалличность и хорошую термодинамическую стабильность с широкой запрещенной зоной около 1.6 электронвольт. В исследовании [3] на основе DFT-моделирования произведен теоретический синтез монослойной кристаллической фазы молекул C₆₀. Фаза была названа qNPC₆₀. В работе [4] с помощью моделирования из первых принципов проводится теоретическое исследование новых решеток фуллеренов с последующей оценкой их стабильности и ключевых физических свойств. Прочность на разрыв и модуль упругости таких материалов достигают необычных значений 50 и 300 ГПа. Текущие исследования [5] раскрывают уникальные свойства фотоэлектрических смесей на основе нефуллереновых акцепторов. В работах также исследуется влияние нанопримесей [6–8]. Исследование [9] посвящено изучению самодиффузии молекул флюида в наноканалах методом молекулярной динамики.

Цель настоящей работы – разработка высокоточного метода расчета динамики крупных молекул и на его основе изучение перехода от плоских сближений фуллеренов к пространственному взаимодействию, а также анализ причины образования кинематических пар сближающихся молекул.

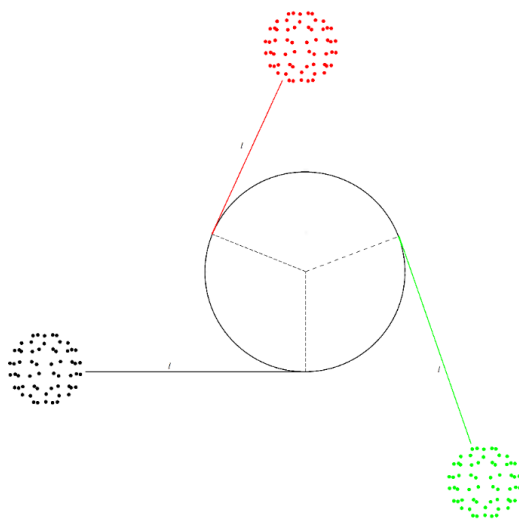


Рис. 1. Схема начального плоского сближения фуллеренов
Fig. 1. Scheme of the initial planar approach of fullerenes

Симметричный характер первоначального сближения молекулярных клеток C60 позволяет лучше понять детали столкновительного взаимодействия фуллеренов. Поэтому рассмотрим плоское симметричное сближение клеток, показанное на рис. 1.

Математическая модель

В настоящей работе фуллерены рассматриваются как абсолютно твердые каркасные структуры с заданным расположением силовых центров (атомов) на кристаллической поверхности. Хотя атомы в углеродной сетке находятся в связанном состоянии, для математического моделирования удобной является модель атом-атомных взаимодействий с эффективными значениями параметров сферического потенциала для атомов углерода, встроенных в кристаллическую сетку графеноподобной структуры. Эти параметры можно определить по температуре небольшой совокупности рассматриваемых фуллеренов, находящихся в адиабатических условиях. Качественная картина взаимодействия отдельных фуллеренов будет слабо зависеть от формы конкретного полуэмпирического потенциала. В результате мы используем классический *LJ*-потенциал, имеющий два параметра в своем представлении.

Движение такой каркасной структуры, как фуллерен, удобнее всего описывать как движение его центра масс и одновременно как поворот всей структуры вокруг этого центра. Для описания этих групп движений существуют уравнения перемещения центров масс каркасных структур, которые в случае трех фуллеренов записываются следующим образом:

$$M \frac{d\mathbf{v}^{(i)}}{dt} = - \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \text{grad} U(\xi_{jk}) - \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N \text{grad} U(\eta_{jk}), \quad (1)$$

$$\frac{d\mathbf{r}^{(i)}}{dt} = \mathbf{v}^{(i)}, \quad i = 1, 2, 3.$$

Здесь $\mathbf{v}^{(i)}$ – скорость центра масс i -го фуллера; $\mathbf{r}^{(i)}$ – радиус-вектор положения этого центра; U – двухпараметрический LJ -потенциал; ξ_{jk} – расстояние между отдельными атомами одной из пар взаимодействующих фуллеренов; η_{jk} – расстояние между атомами во второй паре; M – масса фуллера; N – количество атомов углерода в рассматриваемой каркасной молекуле.

Уравнения перемещения центров масс (1) интегрируются численно при следующих начальных условиях:

$$t = 0, \mathbf{v}^{(i)} = \mathbf{v}_0^{(i)}, \mathbf{r}^{(i)} = \mathbf{r}_0^{(i)}, i = 1, 2, 3. \quad (2)$$

Вторая группа перемещений – это повороты фуллеренов вокруг их собственных центров масс. Повороты описываются уравнениями моментов, а именно для каждого из фуллеренов мы можем записать

$$\frac{d\mathbf{K}^{(i)}}{dt} = \mathbf{M}^{(i)}, i = 1, 2, 3. \quad (3)$$

Здесь $\mathbf{K}^{(i)} = (K_x^{(i)}, K_y^{(i)}, K_z^{(i)})$ – вектор моментов количества движения i -го фуллера; $\mathbf{M}^{(i)}$ – вектор моментов сил, действующих на отдельный фуллерен. $\mathbf{K}^{(i)}$ чаще называют кинетическим моментом каркасной структуры. Этот вектор определяется как произведение тензора инерции на вектор-столбец угловой скорости и в покомпонентном виде записывается следующим образом:

$$\begin{aligned} K_x^{(i)} &= A^{(i)}\omega_x^{(i)} + F^{(i)}\omega_y^{(i)} + E^{(i)}\omega_z^{(i)}, \\ K_y^{(i)} &= F^{(i)}\omega_x^{(i)} + B^{(i)}\omega_y^{(i)} + D^{(i)}\omega_z^{(i)}, \\ K_z^{(i)} &= E^{(i)}\omega_x^{(i)} + D^{(i)}\omega_y^{(i)} + C^{(i)}\omega_z^{(i)}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь мы используем способ определения проекций угловой скорости в абсолютных осях, поэтому компоненты тензора инерции на каждом отдельном шаге и даже в каждой отдельной позиции определенного шага по времени вычисляются по следующим формулам:

$$\begin{aligned} A &= m \sum_{j=1}^N (y_j^2 + z_j^2), B = m \sum_{j=1}^N (x_j^2 + z_j^2), C = m \sum_{j=1}^N (x_j^2 + y_j^2), \\ D &= -m \sum_{j=1}^N y_j z_j, E = -m \sum_{j=1}^N x_j z_j, F = -m \sum_{j=1}^N x_j y_j. \end{aligned} \quad (5)$$

В этих формулах индекс « i », отмечающий принадлежность к конкретному фуллерену, опущен; m – масса атома углерода; x, y, z – координаты j -го атома углерода рассматриваемого фуллера. Следуя подходу атом-атомных взаимодействий силовые члены в правых частях уравнений (3) определяются следующим образом:

$$\mathbf{M}^{(i)} = - \sum_{j=1}^N \mathbf{r}_j^{(i)} \times \sum_{k=1}^N \text{grad} U(\xi_{jk}) - \sum_{j=1}^N \mathbf{r}_j^{(i)} \times \sum_{k=1}^N \text{grad} U(\eta_{jk}). \quad (6)$$

Уравнения (3) служат для определения проекций угловых скоростей фуллеренов на оси абсолютного базиса, поэтому для их интегрирования необходимо использовать следующие начальные условия:

$$t = 0, \boldsymbol{\omega}^{(i)} = \boldsymbol{\omega}_0^{(i)}, i = 1, 2, 3. \quad (7)$$

Как кинетические (5), так и силовые (6) моменты, входящие в уравнение вращательной динамики (3), отнесены к неподвижному центру абсолютного базиса,

поэтому радиусы-векторы $\mathbf{r}_j^{(i)}$, определяющие j -й атом углерода в i -м фуллере, отсчитываются от начала неподвижной системы отсчета. По нашей технологии вычислений эти совокупности координат должны быть найдены в процессе решения задачи. Это нетрудно сделать, если воспользоваться теоремой сложения скоростей для силовых центров (атомов углерода) фуллереновой конструкции, участвующих в сложном движении (трансляционном перемещении вместе с центром масс этой конструкции и во вращательном движении вокруг него):

$$\frac{d\mathbf{r}_j^{(i)}}{dt} = \mathbf{v}^{(i)} + \boldsymbol{\omega}^{(i)} \times (\mathbf{r}_j^{(i)} - \mathbf{r}^{(i)}); i = 1, 2, 3; j = 1, \dots, 60. \quad (8)$$

Последние уравнения интегрируются при следующих условиях, определяющих начальную позицию всех силовых центров фуллеренов:

$$t = 0, \mathbf{r}_j^{(i)} = \mathbf{r}_j^i(0); i = 1, 2, 3; j = 2, \dots, 60. \quad (9)$$

Таким образом, предложенная схема расчета поворотов молекулярной конструкции предполагает вычисление мгновенных значений координат всех ее узлов. В результате поворот молекулярной клетки мы можем определить именно этими координатами, что освобождает от необходимости использования углов Эйлера, а также кватернионов Гамильтона, если возникает потребность преодолеть недостатки подхода Эйлера.

Результаты расчетов

Соотношения (1)–(8) составляют математическую постановку задачи динамики трех сближающихся фуллеренов. Все используемые дифференциальные уравнения являются уравнениями первого порядка относительно скоростей и координат узлов и центров масс рассматриваемых молекулярных конструкций, зависящих лишь от одной переменной – времени. Таким образом, чтобы исследовать динамику рассматриваемой ассоциации крупных молекул, необходимо решить эволюционную задачу 558 дифференциальных уравнений первого порядка. Достаточно давно разработаны схемы класса Рунге–Кутты, обладающие формально высоким порядком точности вычислений относительно шага по времени. Эти схемы ориентированы на использование систем обыкновенных дифференциальных уравнений, явно разрешенных относительно искомых величин. В нашем случае уравнения для проекций кинетического момента не разрешены относительно искомых проекций угловых скоростей фуллеренов.

В настоящей работе анализируются вопросы перехода плоских движений молекул в пространственные, образования кинематических пар фуллеренов, сохранения исходных симметрий движения, образования хаоса при движении малых групп молекулярных объектов, поэтому необходимо, чтобы расчетная схема не потеряла своей заявленной точности вычислений. Выполняя разделение разностных уравнений по угловым скоростям прямым методом, опирающимся на обращение матриц соответствующих систем алгебраических уравнений, мы не снизим точность вычислений исходного метода, поскольку прямой метод является точным в своей основе. Высокая точность схем класса Рунге–Кутты определяется перевычислениями искомых величин в промежуточных позициях каждого шага по времени. Если и в промежуточных позициях способ извлечения компонент

угловой скорости будет опираться на правило Крамера, то мы не понизим заявленной точности исходной схемы расчетов.

Последовательный и глубокий синтез схем разделения угловых перемещений с идеями пересчета в рамках отдельного шага по времени позволил добиться высоких результатов по точности вычислений. На рис. 2, 3 показаны относительные погрешности расчетов полной энергии системы фуллеренов (см. рис. 2) и относительные величины каждой из трех проекций для кинетического момента для системы в целом (см. рис. 3). Такие погрешности можно вычислить благодаря существованию четырех интегралов уравнений движения, имеющих место в рассматриваемых условиях реализации процесса взаимодействия фуллеренов. Во-первых, в системе отсутствует диссипация, или подвод энергии. Значит, кинетическая энергия системы, сложенная с потенциальной энергией взаимодействия элементов, остается постоянной во все время движения. Кроме того, отсутствует момент внешних сил, действующих на рассматриваемую систему. Это приводит к тому, что вектор кинетического момента сохраняет свое положение во времени в пространстве. Это эквивалентно постоянству трех проекций кинетического момента на оси какого-либо базиса. Найденные величины проекций суммарного момента количества движения системы отнесли к начальной величине кинетического момента. Следуя схеме, показанной на рис. 1, мы имеем ненулевое значение суммарного момента. Начальное значение кинетической энергии также отлично от нуля, поскольку рассматривается ситуация активного сближения элементов системы. Таким образом имеем

$$\varepsilon = \frac{H - H(0)}{H(0)}, \varepsilon_x = \frac{K_x - K_x(0)}{K(0)}, \varepsilon_y = \frac{K_y - K_y(0)}{K(0)}, \varepsilon_z = \frac{K_z - K_z(0)}{K(0)}. \quad (10)$$

Здесь H , K – полная энергия системы и модуль кинетического момента; $H(0)$, $K(0)$ – их начальные значения. Как видно из рис. 2, 3, рассчитанные при шаге по времени в одну фемтосекунду величины рассматриваемых погрешностей имеют порядок 10^{-9} безразмерных единиц. Такой порядок погрешности вычислений говорит о высокоточных расчетах молекулярной динамики.

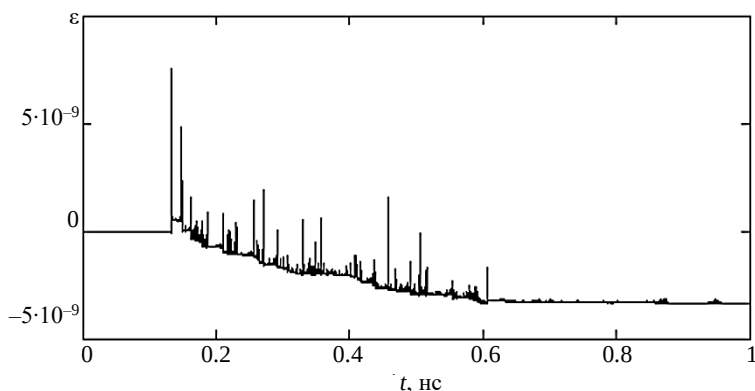


Рис. 2. Относительная погрешность вычисления полной энергии системы
Fig. 2. Relative error in the calculations of total energy of the system

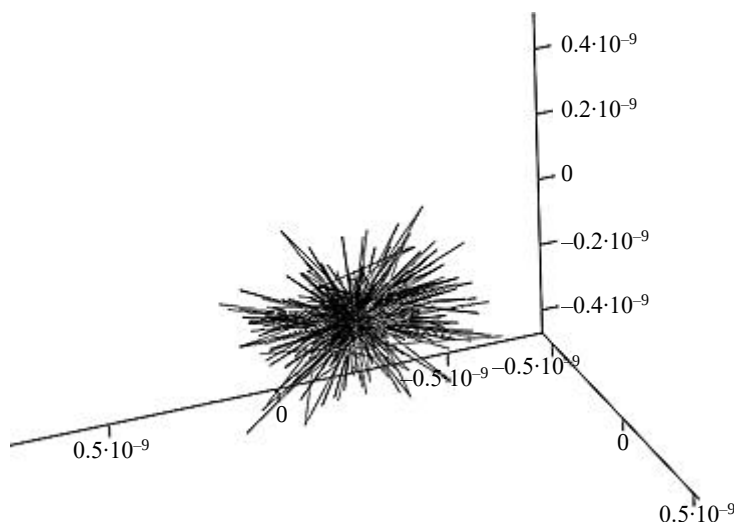


Рис. 3. Относительные погрешности проекции кинетического момента системы фуллеренов

Fig. 3. Relative errors in the projection of the angular momentum of a fullerene system

Как видим из рис. 3, все погрешности расчетов кинетического момента укладываются в куб с ребром $0.5 \cdot 10^{-9}$ безразмерных единиц.

Относительное движение кинематической пары фуллеренов

Симметричный характер начального сближения фуллеренов, показанный на рис. 1, и отсутствие внешних сил, действующих на систему из трех фуллеренов, предполагают, что во все время движения центр масс этой системы будет оставаться в состоянии покоя. Центр масс рассматриваемой ассоциации фуллеренов возьмем за начало абсолютной системы отсчета. Пусть $\mathbf{r}^{(1)}(t)$ – радиус-вектор центра первого фуллерена (черная кривая на рис. 1); $\mathbf{r}^{(2)}(t)$ – радиус-вектор второго фуллерена (красная кривая); $\mathbf{r}^{(3)}(t)$ – третьего (зеленая кривая).

Даже при образовании кинематической пары и в том случае, когда возникает разлет частей первичной ассоциации фуллеренов и третий фуллерен с удвоенной скоростью удаляется от начала абсолютной системы отсчета, положение центра масс системы остается неизменным. При этом если кинематическую пару составляют черный и красный фуллерены, то центр масс пары будет определяться радиус-вектором

$$\mathbf{r}^{(1,2)} = (\mathbf{r}^{(1)} + \mathbf{r}^{(2)}) / 2. \quad (11)$$

Тогда разности векторов

$$\mathbf{r}^{(1)} - (\mathbf{r}^{(1)} + \mathbf{r}^{(2)}) / 2 = (\mathbf{r}^{(1)} - \mathbf{r}^{(2)}) / 2, \quad (12)$$

$$\mathbf{r}^{(2)} - (\mathbf{r}^{(1)} + \mathbf{r}^{(2)}) / 2 = (\mathbf{r}^{(2)} - \mathbf{r}^{(1)}) / 2 \quad (13)$$

будут определять положения каждого из фуллеренов дуэта в системе координат, связанной с перемещением их центра масс. Из (2) и (3) следует, что любая пара

фуллеренов в рассматриваемом классе задач обладает симметрией противостояния относительно центра пары даже если движение этого центра не является инерциальным, как в первой и второй фазах сложного взаимодействия трех фуллеренов. На рис. 4 показаны два ракурса траекторий черного и красного фуллеренов (составляющих стабильный направленно перемещающийся дуэт) в системе координат, связанной с их общим центром. По этим траекториям мы можем сделать заключение об относительном движении составляющих пары.

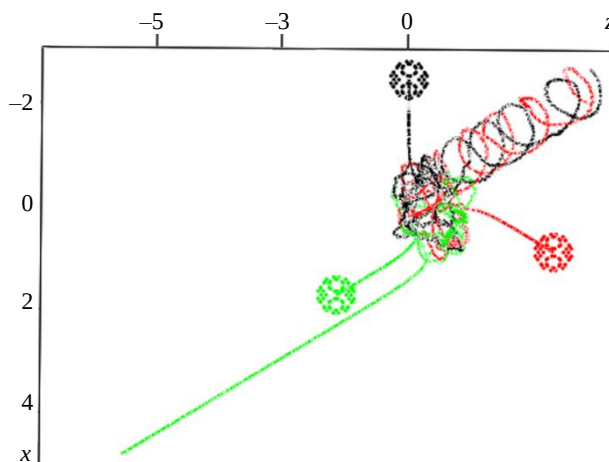


Рис. 4. Трансляционное взаимодействие трех фуллеренов
Fig. 4. Translational interaction of three fullerenes

Рисунок 4 представляет полную картину взаимодействия трех фуллеренов. Здесь к третьей фазе относится двойная красно-черная спираль, а также зеленый прямолинейный фрагмент траектории. Рисунок 5 крупным планом представляет вторую фазу. Наконец, рис. 6 показывает вторую и третью фазы взаимодействия с перемещающимся центром масс красного и черного фуллеренов. Здесь каждая из спиралей выражается в кольцо. На рис. 7 (слева) можно видеть, как для этого случая (отсутствия спинов у фуллеренов) происходит генерация вращательного движения каркасных молекул. С первого же столкновения, которое происходит при $t = 0.125$ нс, они раскручиваются до уровня скоростей 800 нс^{-1} . После столкновения начинается вторая фаза взаимодействия, которая характеризуется большими изменениями амплитуды колебаний угловой скорости. Эта стадия происходит на интервале времени $[0.125, 0.6]$ нс. Затем на третьей стадии, при $t = 0.6$ нс, колебания частот заметно успокаиваются. При этом третий фуллерен, поскольку он выходит из ассоциации взаимодействующих молекул, т.е. значительно удаляется от кинематической пары, получает постоянную для третьей фазы взаимодействия скорость порядка 300 нс^{-1} . Необходимо отметить, что вторая фаза еще не является зоной симметрии, поскольку вращательная энергия в ней распределена неравномерно по элементам системы. Третья фаза в отношении фуллеренов, составляющих кинематическую пару, является существенно более симметричной. То же самое можно сказать и в отношении трансляционных движений, представленных на рис. 7 (справа). Здесь также явно видны три фазы взаимодействия и видна стабилизация флуктуаций в третьей фазе.

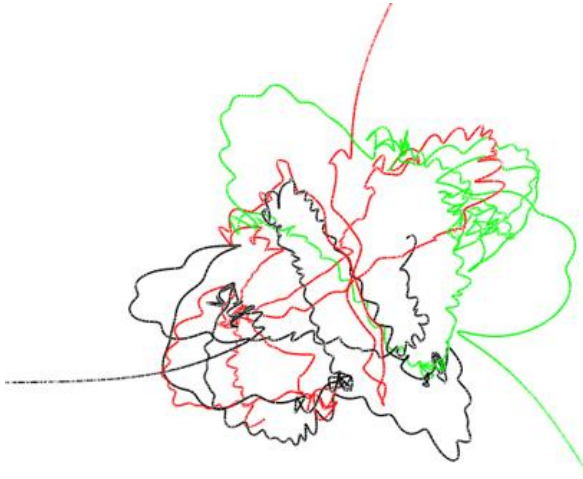


Рис. 5. Крупный план второй фазы взаимодействия
Fig. 5. Close-up view of the second phase interaction

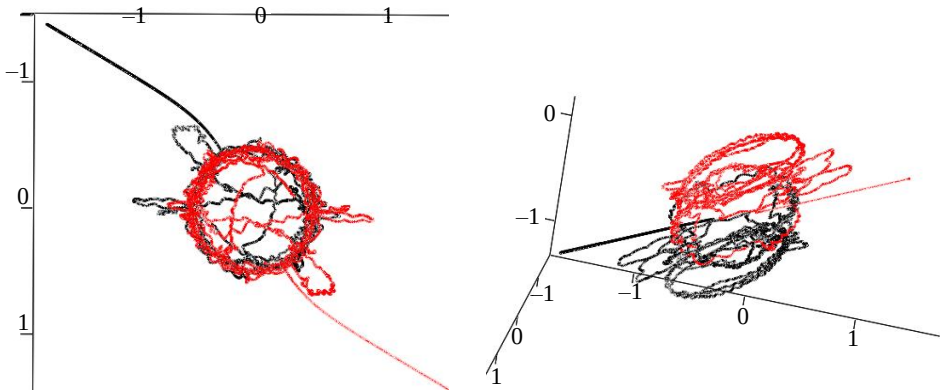


Рис. 6. Взаимные относительные положения фуллеренов
Fig. 6. Mutual relative positions of the fullerenes

На рис. 8 и 9 показан характер тройных столкновений при относительно высоких значениях начальных вращений фуллеренов. Тройное столкновение обычно завершается образованием кинематической пары с отходящим от нее в противоположном направлении с удвоенной (относительно скорости центра масс пары) скоростью третьим свободным фуллереном. Однако это происходит лишь до определенного уровня начальных скоростей вращения. Как показывают расчеты, при одинаковых спинах всех фуллеренов это предельное значение есть $\omega^0 = 366$ ГГц. Дальнейшее увеличение начальной частоты приводит к изменению характера взаимодействия рассматриваемых конструкций. На рис. 9 показано два ракурса тройного столкновения при $\omega^0 = 367$ ГГц. Видно, что после удара фуллерены выходят из плоскости начальных положений. Через их центры масс, конечно, проходит плоскость, но она будет отклонена от исходной на определенный угол. После удара фуллерены будут двигаться с постоянными линейными скоростями,

направления которых уже не лежат в плоскостях их положений. Вся совокупность скоростей положений будет параллельна одной плоскости из-за того, что отраженные фуллерены будут двигаться по прямолинейным траекториям и иметь постоянные скорости, т.е. молекулы всегда находятся в однопараметрическом семействе параллельных плоскостей, составляющих определенный угол с плоскостью их начальных положений. Таким образом, в рассматриваемом примере полностью отсутствует вторая фаза взаимодействия наночастиц и не происходит образования кинематической пары фуллеренов.

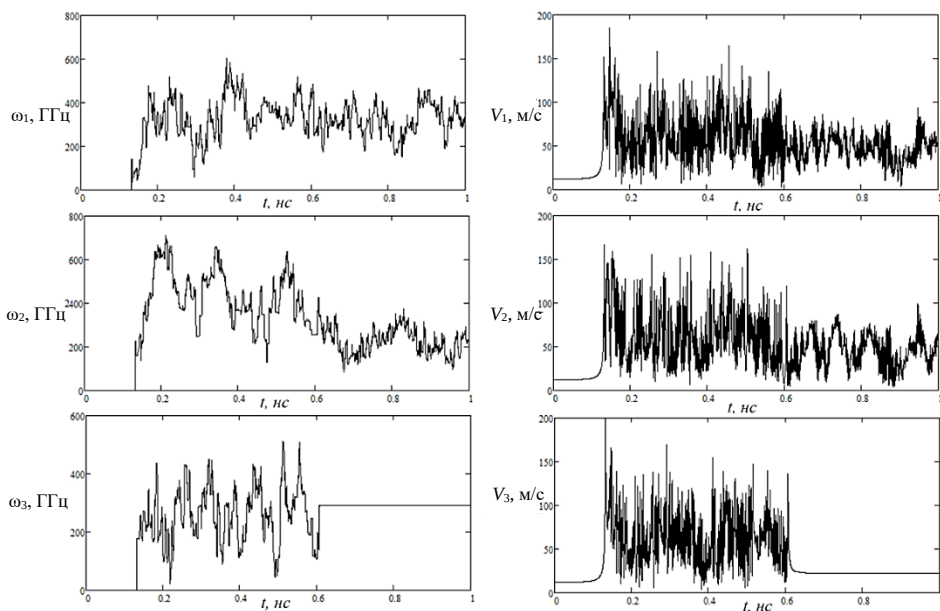


Рис. 7. Полные угловые (слева) и трансляционные (справа) скорости взаимодействующих фуллеренов

Fig. 7. Total angular (on the left) and translational (on the right) velocities of the interacting fullerenes

На рис. 4 показана картина плоского сближения фуллеренов, их столкновение и переход в пространственное движение с образованием кинематической пары. Анализ траекторий показывает, что во взаимодействии трех фуллеренов можно выделить фазу плоского сближения, фазу пространственного взаимодействия трех молекулярных объектов с образованием кинематической пары и фазу разлета пары и третьего фуллерена. В дальнейшем будем называть их первая, вторая и третья фазы. На рис. 5 крупным планом представлена вторая фаза. Глядя на эту картину, можно выделить фрагменты траекторий, составляющих плоские лепестки спутанного бутона. Здесь также имеется симметрия, которую трудно разглядеть на плоской проекции сложной пространственной картины. Трудность восприятия такой симметрии заключается в том, что она относится к какой-либо паре фуллеренов и реализуется в подвижной системе, связанной с движением центра масс рассматриваемой пары. При этом третий фуллерен (его центр масс)

участвует в этой симметрии тогда, когда мы рассматриваем другую пару, куда он непосредственно входит. Плоские лепестковые фрагменты траекторий первоначально могут находиться в исходной плоскости (плоскости начального положения фуллеренов). Потом плоскости лепестков поворачиваются относительно первичной плоскости на определенный угол, зависящий от характера критического сближения фуллеренов. Таким образом, даже во второй фазе трансляционные движения фуллеренов далеко не являются полным хаосом. Что касается третьей фазы, то здесь (см. рис. 6) перемещения фуллеренов являются еще более определенными.

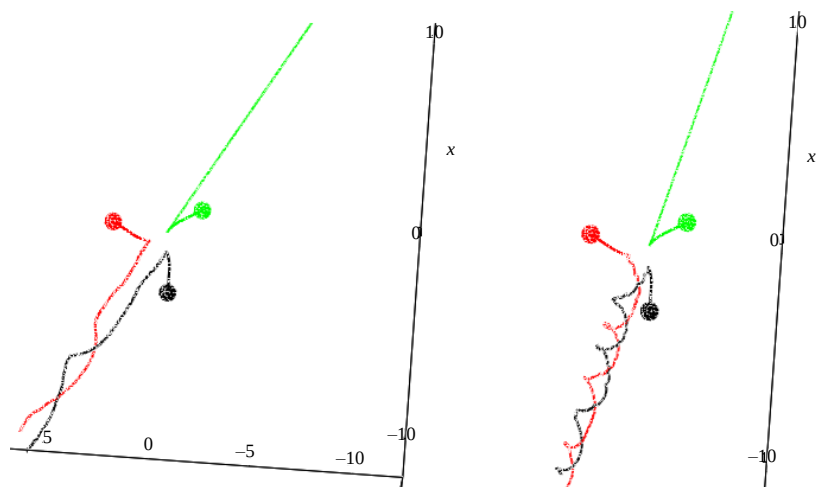


Рис. 8. Траектории центров масс фуллеренов при угловых скоростях каждой молекулы 365 ГГц (слева) и 366 ГГц (справа)

Fig. 8. Trajectories of the centers of mass of the fullerenes at angular velocities of each molecule of 365 GHz (on the left) and 366 GHz (on the right)

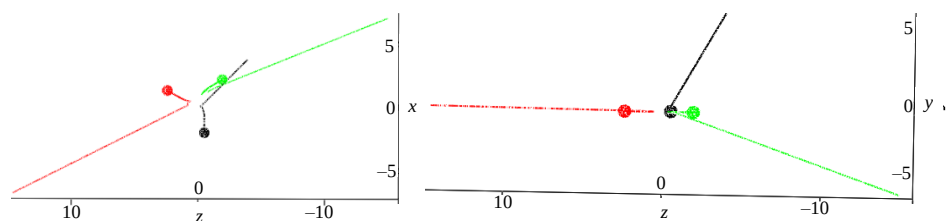


Рис. 9. Два ракурса траекторного столкновения при $\omega^0 = 367$ ГГц

Fig. 9. Two angles of the trajectory collision at $\omega^0 = 367$ GHz

В данном случае движение каждого из фуллеренов, находящихся в паре во второй фазе взаимодействия, осуществляется по кольцевым траекториям. Причем кольца траекторий разнесены в пространстве, но при этом наблюдается симметрия противостояния относительно центра пары удаляющегося от области первоначального взаимодействия с постоянной скоростью. Таким образом кинематическая пара существует в стабильном состоянии.

Заключение

Показано, что при шаге по времени в одну фемтосекунду может быть достигнута очень высокая точность расчета относительно кинематических и энергетических параметров взаимодействия, что позволило выявить детали, связанные с симметрией относительного противостояния молекулярных объектов, а также разъяснить особенности и характер перехода плоских движений взаимодействующих объектов в пространственное взаимодействие фуллеренов, в частности взаимодействие с образованием кинематической пары. Вскрыта также роль начального спина фуллеренов, который перекрывает возможности перехода кинематической энергии из резервуара трансляционной энергии в энергию вращений, и это делает невозможным образование кинематической пары.

Таким образом, тройное столкновение фуллеренов в общем случае является сложным процессом, в котором даже в частном случае плоских сближений можно выделить три фазы: начальное плоское движение, многолистное пространственное взаимодействие трех объектов и двойная спираль взаимодействующих молекул с линейным движением отброшенного фуллерена.

Список источников

1. Baskar A.V., Benzigar M.R., Talapaneni S.N., Singh G., Karakoti A. S., Yi J., Al-Muhtaseb A.H., Ariga K., Ajayan P.M., Vinu A. Self-Assembled Fullerene Nanostructures: Synthesis and Applications // *Advanced Functional Materials*. 2022. V. 32. Art. 2106924. doi: 10.1002/adfm.202106924
2. Hou L., Cui X., Guan B., Wang S., Li R., Liu Y., Zhu D., Zheng J. Synthesis of a monolayer fullerene network // *Nature*. 2022. V. 606. P. 507–510. doi: 10.1038/s41586-022-04771-5
3. Tromer R., Ribeiro L., Galvao D. A DFT study of the electronic, optical, and mechanical properties of a recently synthesized monolayer fullerene network // *Chemical Physics Letters*. 2022. V. 804. Art. 139925. doi: 10.1016/j.cplett.2022.139925
4. Mortazavi B. Structural, electronic, thermal and mechanical properties of C60-based fullerene two-dimensional networks explored by first-principles and machine learning // *Carbon*. 2023. V. 213. Art. 118293. doi: 10.1016/j.carbon.2023.118293
5. Guangqing Z., Ming Z., Xu J., Yankang Y., Hao T., Zhu L., Zhou L., Zhu H., Zou Y., Wei G., Zhang Y., Liu F. Spontaneous Carrier Generation and Low Recombination in High-Efficiency Non-fullerene Solar Cells // *Energy & Environmental Science*. 2022. V. 15. P. 3486–3493. doi: 10.1039/D2EE01327D
6. Афанасьева С.А., Бирюков Ю.А., Белов Н.Н. и др. Повышение эффективности высокоскоростного метания ударников с применением высокоэнергетических топлив с нанодисперсными наполнителями // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2012. № 2 (18). С. 67–79.
7. Крайнов А.Ю., Порязов В.А., Моисеева К.М. Скорость распространения пламени в аэрозвеси наноразмерного порошка алюминия // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2018. № 53. С. 95–106.
8. Ворожцов А.Б., Данилов П.А., Жуков И.А. и др. Влияние внешних воздействий на расплав и неметаллических наночастиц на структуру и механические характеристики легких сплавов на основе алюминия и магния // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2020. № 64. С. 91–107.
9. Андрищенко В.А., Рудяк В.Я. Самодиффузия молекул флюида в наноканалах // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2012. № 2. С. 63–66.

References

1. Baskar A.V., Benzigar M.R., Talapaneni S.N., Singh G., Karakoti A.S., Yi J., Al-Muhtaseb A.H., Ariga K., Ajayan P.M., Vinu A. (2022) Self-assembled fullerene nanostructures: synthesis and applications. *Advanced Functional Materials*. 32. Article 2106924. doi: 10.1002/adfm.202106924
2. Hou L., Cui X., Guan B., Wang S., Li R., Liu Y., Zhu D., Zheng J. (2022) Synthesis of a monolayer fullerene network. *Nature*. 606. pp. 507–510. doi: 10.1038/s41586-022-04771-5
3. Tromer R., Ribeiro L., Galvao D. (2022) A DFT study of the electronic, optical, and mechanical properties of a recently synthesized monolayer fullerene network. *Chemical Physics Letters*. 804. Article 139925. doi: 10.1016/j.cplett.2022.139925
4. Mortazavi B. (2023) Structural, electronic, thermal and mechanical properties of C₆₀-based fullerene two-dimensional networks explored by first-principles and machine learning. *Carbon*. 213. Article 118293. doi: 10.1016/j.carbon.2023.118293
5. Guanqing Z., Ming Z., Xu J., Yankang Y., Hao T., Zhu L., Zhou L., Zhu H., Zou Y., Wei G., Zhang Y., Liu F. (2022) Spontaneous carrier generation and low recombination in high-efficiency non-fullerene solar cells. *Energy & Environmental Science*. 15. pp. 3486–3493. doi: 10.1039/D2EE01327D
6. Afanas'eva S.A., Biryukov Yu.A., Belov N.N., Burkin V.V., Ishchenko A.N., Kartashov Yu.I., Kasimov V.Z., Fomenko V.V., Yugov N.T. (2012) Povyshenie effektivnosti vysokoskorostnogo metaniya udarnikov s primeneniem vysokoenenergeticheskikh topliv s nanodispersnymi napolnitelyami [Increase of efficiency of high-speed throwing of strikers application of high-energy fuels with nanodispersed fillers]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 2(18). pp. 67–79.
7. Kraynov A.Yu., Poryazov V.A., Moiseeva K.M. (2018). Skorost' rasprostraneniya plameni aerovzvesi nanorazmernogo poroshka alyuminiya [Flame propagation velocity in an aerosuspension of nanoscale aluminum powder]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 53. pp. 95–106. doi: 10.17223/19988621/53/9
8. Vorozhtsov A.B., Danilov P.A., Zhukov I.A., Khmeleva M.G., Platov V.V., Valikhov V.D. (2020) Vliyanie vneshnikh vozdeystviy na rasplav i nemetallicheskih nanochastits na strukturu i mekhanicheskie kharakteristiki legkikh splavov na osnove alyuminiya i magniya [The effect of external actions on a molten metal and the influence of nonmetallic nanoparticles on the structure and mechanical properties of the light alloys based on aluminum and magnesium]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 64. pp. 91–107. doi: 10.17223/19988621/64/7
9. Andryushchenko V.A., Rudyak V.Ya. (2012) Samodiffuziya molekul flyuida v nanokanalakh [Self-diffusion of fluid molecules in nanochannels]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 2(18). pp. 63–66.

Сведения об авторах:

Бородин Владислав Иванович – Генеральный директор ООО «Газпром трансгаз Томск» (Томск, Россия), аспирант Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: borodinttgazprom@mail.ru

Бубенчиков Михаил Алексеевич – доктор физико-математических наук, доцент кафедры теоретической механики Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: michael121@mail.ru

Бубенчиков Алексей Михайлович – доктор физико-математических наук, профессор кафедры теоретической механики Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: bubenchikov_am@mail.ru

Мамонтов Дмитрий Владимирович – младший научный сотрудник Регионального научно-образовательного математического центра Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: orevaore@mail.ru

Information about the authors:

Borodin Vladislav I. (Chief Executive Officer, Lead Engineer, Gazprom Transgaz Tomsk, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: borodingtgazprom@mail.ru

Bubenchikov Mikhail A. (Doctor of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: michael121@mail.ru

Bubenchikov Aleksey M. (Doctor of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: bubenchikov_am@mail.ru

Mamontov Dmitriy V. (Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: orevaore@mail.ru

Статья поступила в редакцию 01.03.2024; принята к публикации 05.08.2024

The article was submitted 01.03.2024; accepted for publication 05.08.2024

Научная статья

УДК 539.375

doi: 10.17223/19988621/90/7

К нахождению потока удельной упругой энергии в вершину физического разреза при конечно-элементном решении

Вадим Вадимович Глаголев¹, Андрей Игоревич Лутхов²

^{1,2} Тульский государственный университет, Тула, Россия

¹ vadim@tsu.tula.ru

² tip460@mail.ru

Аннотация. Рассмотрено нагружение трещиноподобного дефекта в виде физического разреза в двухконсольной балке по модам I и II. Значение J -интеграла определялось в виде произведения линейного параметра и среднего значения удельной свободной энергии на тупиковой грани конечного элемента. Представлено сравнение значения J -интеграла, потока удельной упругой энергии в вершину математического разреза и удельной работы узловых сил при удалении тупикового конечного элемента.

Ключевые слова: коэффициент интенсивности напряжений, математический разрез, физический разрез, поток упругой энергии, метод конечных элементов, линейный параметр, J -интеграл, подход Нейбера–Новожилова

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-21-00017, <https://rscf.ru/project/23-21-00017/> в Тульском государственном университете.

Для цитирования: Глаголев В.В., Лутхов А.И. К нахождению потока удельной упругой энергии в вершину физического разреза при конечно-элементном решении // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2024. № 90. С. 78–89. doi: 10.17223/19988621/90/7

Original article

On the determination of specific elastic energy flow to the vertex of a physical cut via a finite element solution

Vadim V. Glagolev¹, Andrey I. Lutkhov²

^{1,2} Tula State University, Tula, Russian Federation

¹ vadim@tsu.tula.ru

² tip460@mail.ru

Abstract. The finite element approximation of a double cantilever beam (DCB) specimen with a physical cut in a linear elastic medium is considered. The thickness of the physical cut specifies a linear parameter of the problem. The J -integral is determined as the product

of the linear parameter and the average value of the specific elastic energy on the dead-end edge of the finite element. For the considered loading schemes of the DCB specimen in modes I and II with zero linear parameter set in ANSYS, the stress intensity factors are obtained and used to determine the J -integrals. The convergence of the product of the linear parameter and the average value of the specific elastic energy on the dead-end edge of the finite element to the reference values of the J -integrals is shown for equivalent loading of the specimen with a physical cut and with a linear parameter tending to zero. The specific work of nodal forces is studied during the dead-end finite element removing. The convergence of the specific work of nodal forces when removing the dead-end element by simple unloading of adjacent edges to the value of the reference J -integral is observed.

Keywords: stress intensity factor, mathematical cut, physical cut, elastic energy flow, finite element method, linear parameter, J -integral, Neuber –Novozhilov approach

Acknowledgments: This study was supported by the Russian Science Foundation (project No. 23-21-00017), <https://rscf.ru/project/23-21-00017/> at Tula State University.

For citation: Glagolev, V.V., Lutkhov, A.I. (2024) On the determination of specific elastic energy flow to the vertex of a physical cut via a finite element solution. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 90. pp. 78–89. doi: 10.17223/19988621/90/7

Введение

Решение задач с концентраторами напряжений в виде трещиноподобного дефекта связано с моделью трещины. Для трещины Гриффитса [1, 2] в виде математического разреза в линейно упругой среде решение задачи с сингулярным полем напряжений сопряжено с вычислением коэффициентов интенсивности напряжений (КИН) [2–4]. В этом случае используются как аналитические, так и численные решения, в том числе полученные методом конечных элементов (МКЭ) [5–7] и граничных элементов [8]. В качестве критериальной характеристики при этом рассматривается поток удельной, отнесенной к единице образуемых поверхностей, упругой энергии в вершину трещины, связанный с J -интегралом [9–11].

Трещина в разрезе с различной формой окончания может быть рассмотрена на разных масштабных уровнях. Толщина дефекта в виде физического разреза или радиус кривизны окончания разреза являются в этом случае естественными линейными параметрами. В работе [12] с помощью методов молекулярной динамики исследовалась трещина нормального отрыва. Показано, что определение критических характеристик задачи сводится к энергетическому критерию Гриффитса как для бездефектных тел, так и для тел с трещинами различной формы на различных масштабных уровнях. Аналогичный результат получен и для модели связей Прандтля [13, 14] для которых начальная длина определяет масштабный уровень трещиноподобного дефекта.

Физический разрез в сплошной среде является источником сингулярности в его угловых точках [15]. Однако конечно-элементное решение задачи с гранью конечного элемента, равного соответствующему вырезу, приводит к конечным напряжениям. Таким образом, напряженное состояние конечного элемента, лежащего на продолжении физического разреза, является регулярным при конечном значении толщины разреза, принимаемой в качестве линейного параметра.

Следуя концепции Нейбера–Новожилова [16–20], в данной работе найдена усредненная удельная, отнесенная к единице объема, свободная энергия по грани окончания физического разреза. Рассмотрены произведения линейного параметра и средней по грани удельной, отнесенной к единице объема, свободной энергии. Показано, что уменьшение линейного параметра приводит к сходимости введенных произведений к значению эталонного J -интеграла, найденного по коэффициенту интенсивности напряжений для схемы с нулевым значением линейного параметра в пакете ANSYS [21].

Следуя концепции удаления конечного элемента простой разгрузкой [22], найдена полная работа узловых сил на перемещениях тупикового элемента. Показана эквивалентность значения эталонного J -интеграла и соответствующей удельной работы при уменьшении значения линейного параметра.

Постановка задачи

На рис. 1 представлены схемы нагружения образца в виде двойной консольной балки (ДКБ), на консоли которого действуют единичные внешние распределенные нагрузки P , со следующими геометрическими и механическими характеристиками: длина образца $l = 0.2$ м, длина трещины $a = l/4$, ширина консоли $h = (b - \delta_0)/2$, ширина ДКБ-образца $b = 2h + \delta_0$, где δ_0 – варьируемая толщина физического разреза, модуль упругости $E = 2 \cdot 10^{11}$ Па, коэффициент Пуассона $\nu = 0.3$. Правый торец ДКБ-образца жестко закреплен от перемещений.

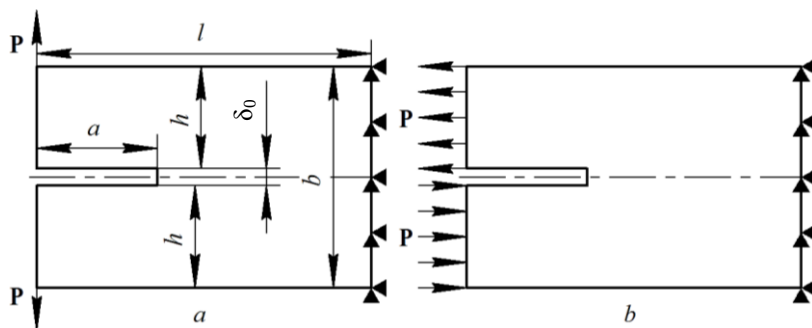


Рис. 1. Модель ДКБ-образца: a – нагрузка, формирующая нормальный разрыв тупикового элемента; b – нагрузка, формирующая поперечный сдвиг тупикового элемента

Fig. 1. Model of a double cantilever beam (DCB): (a) tension and (b) shearing of the dead-end element induced by the load

При $\delta_0 = 0$ модуль внешней нагрузки P (см. рис. 1, a) определяет коэффициент интенсивности напряжений K_I трещины нормального отрыва [2], а в схеме (см. рис. 1, b) – коэффициент интенсивности напряжений K_{II} трещины поперечного сдвига [2]. С помощью комплекса ANSYS вычислены значение КИН соответствующей моды нагружения $K_I(K_{II})$. Результаты расчетов приведены в табл. 1.

Поток удельной упругой энергии в вершину трещины для плоской задачи связан с КИН следующим соотношением [2]:

$$2\gamma_{I(II)} = \alpha K_{I(II)}^2 / E, \quad (1)$$

где $\alpha = 1$ для плоского напряженного состояния; $\alpha = 1 - \nu^2$ для плоского деформированного состояния. Отметим, что в случае обратимого (упругого) деформирования (1) определяет значение J -интеграла [2].

Таблица 1

Расчетные значения КИН

Искомая величина	Значение
Коэффициент интенсивности напряжений K_I , Н/м ^{3/2}	1 294.6
Коэффициент интенсивности напряжений K_{II} , Н/м ^{3/2}	111.75

При дальнейшем изложении без ограничения общности ограничимся случаем плоской деформации. Из (1) находим эталонное численное значение потока энергии в вершину математического разреза. Результаты расчета приведены в табл. 2.

Таблица 2

Расчетные значения потоков упругой энергии

Искомая величина	Значение
Поток упругой энергии $2\gamma_I$, Н/м	$7.63 \cdot 10^{-6}$
Поток упругой энергии $2\gamma_{II}$, Н/м	$5.68 \cdot 10^{-8}$

Пусть в линейно упругом конечно-элементном решении окончание трещины формирует грань прямоугольного конечного элемента $\delta_0 \times \delta_1$ с квадратичными функциями формы. На рис. 2 показан конечный элемент на окончании физического разреза.

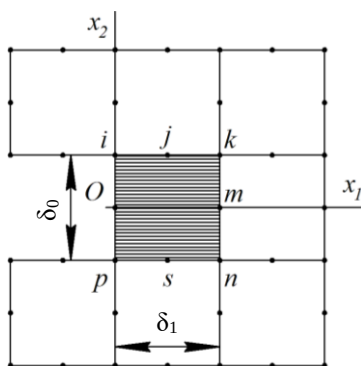


Рис. 2. Конечный элемент на окончании физического разреза

Fig. 2. Finite element at the end of a physical cut

При конечно-элементной аппроксимации геометрии будем требовать выполнения следующего условия: $\delta_1 = \delta_0$.

В случае квазистатического продвижения в упругой среде физического разреза с регулярным полем напряжений в работе [23] показано, что J -интеграл определяется произведением линейного параметра и удельной свободной энергии на торце физического разреза.

Ввиду конечности напряженного состояния конечно-элементного решения при фиксированном разбиении введем в рассмотрение произведение толщины физического разреза и средней удельной свободной энергии концевой грани ip (см. рис. 2) конечного элемента

$$2\bar{\gamma} = \delta_0 \bar{\varphi}, \quad (2)$$

где, исходя из концепции Нейбера–Новожилова, $\bar{\varphi} = 1/\delta_0 \int_{-\delta_0/2}^{\delta_0/2} \varphi dx_2$; $\varphi = 0.5(\sigma_{11}\varepsilon_{11} + \sigma_{22}\varepsilon_{22} + 2\sigma_{12}\varepsilon_{12})$ – удельная свободная энергия; $\sigma_{11}, \sigma_{22}, \sigma_{12}$ – компоненты тензора напряжений; $\varepsilon_{11}, \varepsilon_{22}, \varepsilon_{12}$ – компоненты тензора деформаций.

Продвижение физического разреза в конечно-элементном решении сопряжено с удалением конечных элементов. Поток удельной упругой энергии, согласно Гриффитсу [1], определяет поверхностную энергию новых материальных поверхностей. Найдем значение соответствующей энергии. Будем считать, что процесс удаления конечного элемента происходит при достижении определенного критерия. Следуя работе [22], рассмотрим исключение элемента в виде простой разгрузки его узловых сил, взаимодействующих с сопряженными элементами. Соответствующие силы для плоского конечного элемента с квадратичными функциями формы показаны на рис. 3.

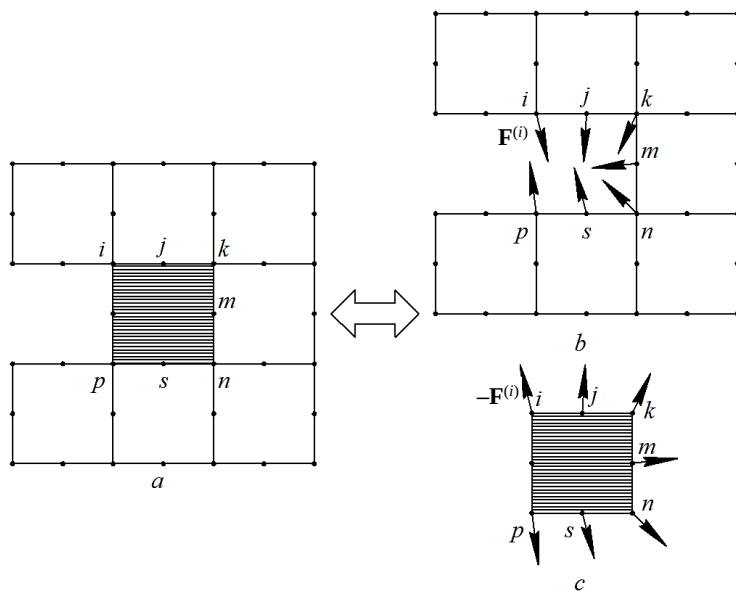


Рис. 3. Взаимодействие конечного элемента со смежными посредством узловых сил

Fig. 3. Interaction of the finite element with adjacent ones through nodal forces

На рис. 3, *b* показано тело без тупикового элемента, но за его присутствие в ансамбле конечных элементов отвечают узловые силы взаимодействия $F^{(e)}, e = i, j, k, m, n, p$. Для моделирования удаления тупикового элемента разгрузим узлы от сил взаимодействия, связывающих тупиковый конечный элемент с телом, при неизменной внешней нагрузке. На рис. 4 продемонстрирована схема разгрузки.

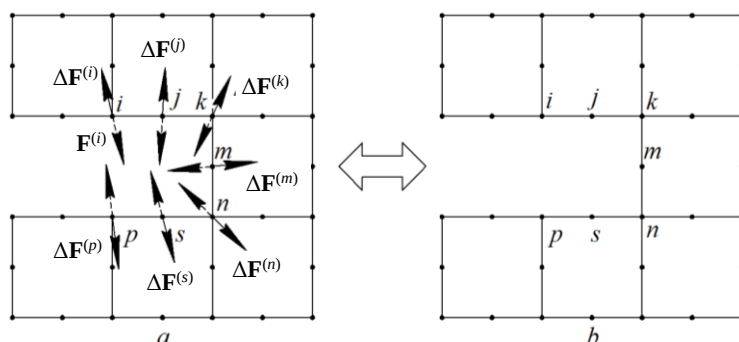


Рис. 4. Разгрузка новых материальных поверхностей

Fig. 4. Unloading of new material surfaces

На рис. 4, а значения $\Delta \mathbf{F}^{(e)}$ устанавливают приращения новой внешней узловой нагрузки. Приращения находятся, исходя из условия $\Delta \mathbf{F}^{(e)} + \mathbf{F}^{(e)} = 0$. Приращение внешней нагрузки при задании $\Delta \mathbf{F}^{(e)}$ предполагается нулевым. Конечная стадия этапа разгрузки показана на рис. 4, б, причем узлы i, j, k, m, n, o, p освобождаются от узловых сил, действовавших на них со стороны исключаемого элемента. Перемещения соответствующих узлов в момент перед удалением тупикового конечного элемента обозначим через $\mathbf{u}^{(e)}$, а в результате разгрузки – через $\mathbf{u}^{1(e)}$. Найдем соответствующую работу узловых сил конечного элемента

$$A = 0.5 \sum_{e=1}^7 \mathbf{F}^{(e)} \cdot \mathbf{u}^{(e)}. \quad (3)$$

Будем считать, что силы $\Delta \mathbf{F}^{(e)}$ завершают процесс исключения элемента, совершая дополнительную работу над его узлами, тогда дополнительную работу определим в следующем виде:

$$A_1 = 0.5 \sum_{e=1}^7 \Delta \mathbf{F}^{(e)} \cdot \mathbf{u}^{1(e)}, \quad (4)$$

где $\cdot$ – скалярное умножение.

Работы (3) и (4) в случае выполнения критерия удаления элемента формируют энергию новых материальных поверхностей. Таким образом, работа на единицу образуемой поверхности будет равна сумме работ (3) и (4), отнесенных к $\delta_1 = \delta_0$ (см. рис. 2):

$$2\hat{\gamma} = (A + A_1) / \delta_0. \quad (5)$$

Рассмотрим связи (2), (5) с (1) для мод нагружения I и II при конечно-элементном решении в комплексе ANSYS.

Нагружение по моде I

На рис. 5 представлена зависимость относительного значения $\gamma_I^* = \bar{\gamma} / \gamma_I$ от относительной величины физического разреза $\bar{\delta}_0 = \delta_0 / h$ при приложении нагрузки $\mathbf{P}$, которая формирует нормальный разрыв тупикового элемента.

На рис. 6 представлена зависимость относительного значения $\tilde{\gamma}_I = \hat{\gamma} / \gamma_I$ от относительной величины физического разреза $\bar{\delta}_0$ при приложении нагрузки $\mathbf{P}$, которая формирует нормальный разрыв тупикового элемента.

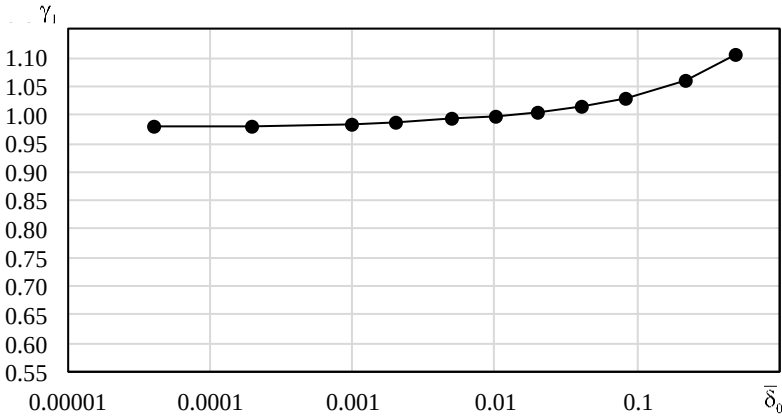


Рис. 5. Зависимость относительного значения потока удельной упругой энергии на грани конечного элемента от относительной толщины физического разреза
Fig. 5. Relative value of specific elastic energy flow on the edge of the finite element as a function of relative thickness of the physical cut

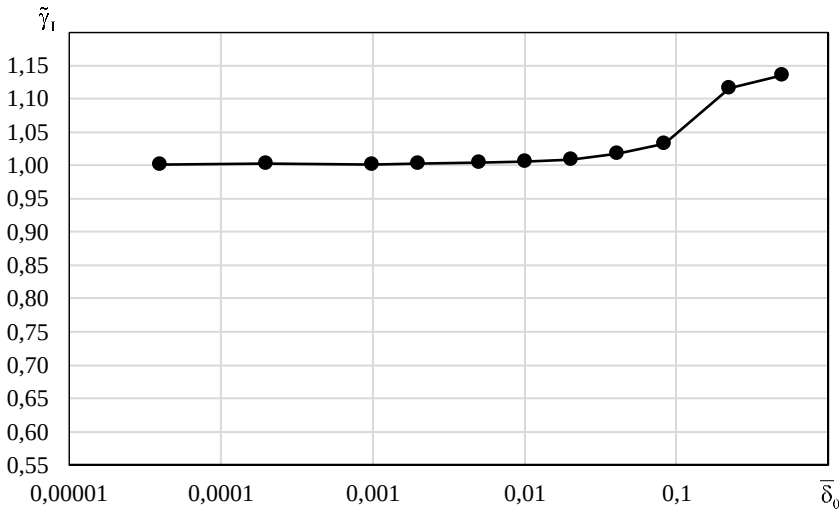


Рис. 6. Зависимость удельной работы узловых сил при удалении тупикового элемента от относительной толщины физического разреза
Fig. 6. Dependence of the specific work of nodal forces on the relative thickness of the physical cut when removing a dead-end element

Для нагружения ДКБ-образца с математическим разрезом по моде I в состоянии плоской деформации известно решение J -интеграла [24]:

$$J = 12(Ph)^2(1 - \nu^2)/(hE)(a/h)^2[1 + 0.673(h/a)]^2. \quad (6)$$

В табл. 3 представлены результаты расчетов потоков удельной упругой энергии по формулам (1), (2), (5), (6), погрешность решений приведена по отношению к значению относительного потока упругой энергии, вычисленному по КИН K_I .

Таблица 3

Результаты расчетов при нагружении по моде I

Решение		Поток удельной упругой энергии $2\gamma_i$, Н/м	Погрешность решений, %
Формула (6)		$7.64 \cdot 10^{-6}$	0.2
Численное	По КИН K_I (1)	$7.63 \cdot 10^{-6}$	–
	По представлению (2)	$7.46 \cdot 10^{-6}$	2.18
	Удельная работа узловых сил при удалении элемента (5)	$7.64 \cdot 10^{-6}$	0.13

Из результатов табл. 3 видно, что выражение (5) при значении относительной толщины физического разреза $\bar{\delta}_0 = 0.00004$ дает более близкое значение к потоку упругой энергии трещины Гриффитса по сравнению с (2).

Нагружение по моде II

На рис. 7 представлена зависимость относительного значения $\gamma_{II}^* = \bar{\gamma} / \gamma_{II}$ от относительной величины физического разреза $\bar{\delta}_0$ при приложении нагрузки P , которая формирует поперечный сдвиг тупикового элемента.

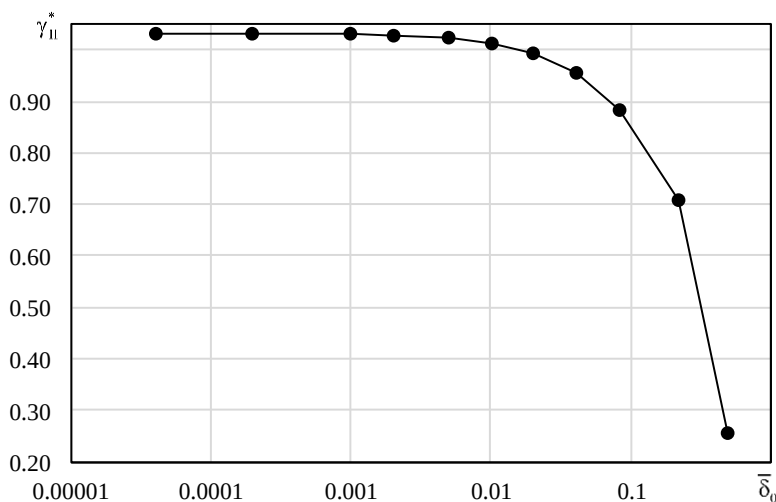


Рис. 7. Зависимость относительного значения потока удельной упругой энергии на грани конечного элемента от относительной толщины физического разреза

Fig. 7. Relative value of specific elastic energy flow on the edge of the finite element as a function of relative thickness of the physical cut

Рисунок 8 демонстрирует зависимость относительного значения $\tilde{\gamma}_{II} = \hat{\gamma} / \gamma_{II}$ от относительной величины физического разреза $\bar{\delta}_0$ при приложении нагрузки P , которая формирует поперечный сдвиг тупикового элемента.

В табл. 4 представлены результаты расчетов потоков удельной упругой энергии по формулам (1), (2), (5), погрешность решений приведена по отношению к значению относительного потока упругой энергии, вычисленному по КИН K_{II} .

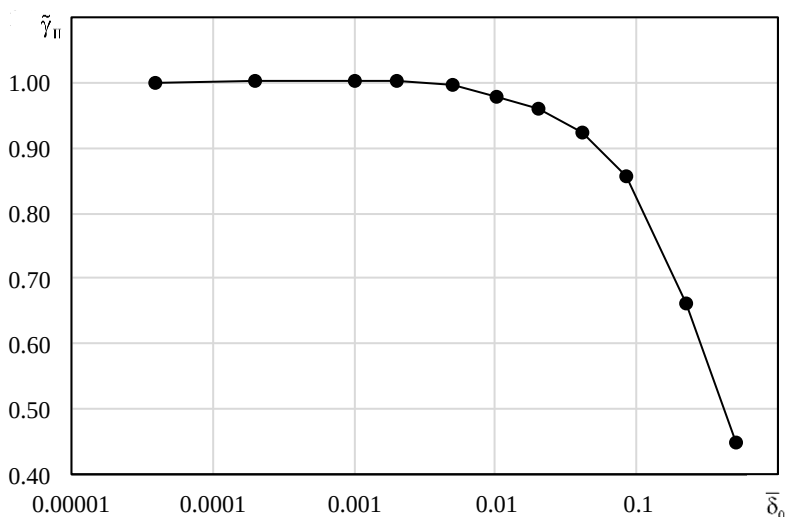


Рис. 8. Зависимость удельной работы узловых сил при удалении тупикового элемента от относительной толщины физического разреза

Fig. 8. Dependence of the specific work of nodal forces on the relative thickness of the physical cut when removing a dead-end element

Таблица 4

Результаты расчетов при нагружении по моде II

Численное решение	Поток удельной упругой энергии $2\gamma_{II}$, Н/м	Погрешность решений, %
По КИН K_{II} (1)	$5.682 \cdot 10^{-8}$	—
По представлению (2)	$5.871 \cdot 10^{-8}$	3.2
Удельная работа узловых сил при удалении элемента (5)	$5.683 \cdot 10^{-8}$	0.02

Из результатов табл. 4 видно, что выражение (5) при значении относительной толщины физического разреза $\bar{\delta}_0 = 0.00004$ при нагружении по моде II, как и в случае моды I, дает более близкое значение к потоку удельной упругой энергии трещины Гриффитса по сравнению с (2) при конечно-элементном решении задачи.

Заключение

На основе концепции J -интеграла и подхода Нейбера–Новожилова для трещиноподобного дефекта в виде физического разреза найден поток удельной упругой энергии в виде произведения длины грани тупикового конечного элемента и ее средней удельной свободной энергии. Для мод нагружения I и II при вырождении физического разреза в математический показана вычислительная сходимость введенного произведения на тупиковой грани конечного элемента к значению, близкому к потоку удельной упругой энергии трещины Гриффитса.

При удалении конечного элемента посредством простой разгрузки узловых сил, взаимодействующих со смежными конечными элементами, показана эквива-

лентность удельной полной работы узловых сил на узловых перемещениях элемента к эталонному значению J -интеграла при стремлении длины его грани к нулевому значению. Показано, что при малых значениях линейного параметра удельная полная работа узловых сил при исключении элемента практически не меняет своего значения. Размер грани тупикового конечного элемента определяет конечно-элементную аппроксимацию, в которой удаление элемента приводит к соизмеримому с математическим разрезом потоком удельной упругой энергии в вершину трещиноподобного дефекта.

Таким образом, по сходимости произведения длины грани тупикового конечного элемента и ее средней удельной свободной энергии или удельной работы узловых сил при удалении тупикового элемента возможно проводить оценку коэффициента интенсивности напряжений для модели трещины в виде математического разреза. При этом результат вычисления посредством удельной работы узловых сил при удалении элемента оказывается более близким к соответствующему коэффициенту.

Список источников

1. Griffith A.A. The phenomena of rupture and flow in solids // Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Ser. A. 1921. V. 221. P. 163–189. doi: 10.1098/rsta.1921.0006
2. Черепанов Г.П. Механика хрупкого разрушения. М. : Наука, 1974. 640 с.
3. Мураками Ю. Справочник по коэффициентам интенсивности напряжений. М. : Мир, 1990. 1014 с.
4. Малик А.В., Лавит И.М. Метод расчета коэффициента интенсивности напряжений для неподвижной трещины нормального разрыва при динамическом нагружении // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2018. № 54. С. 88–102. doi: 10.17223/19988621/54/8
5. Murakami Y. A simple procedure for the accurate determination of stress intensity factors by finite element method // Engineering Fracture Mechanics. 1976. V. 8 (4). P. 643–655. doi: 10.1016/0013-7944(76)90038-2
6. Rybicki E.F., Kanninen M.F. A finite element calculation of stress intensity factors by a modified crack closure integral // Engineering Fracture Mechanics. 1977. V. 9 (4). P. 931–938. doi: 10.1016/0013-7744(77)90013-3
7. Caicedo J., Portela A. Direct computation of stress intensity factors in finite element method // European Journal of Computational Mechanics. 2017. V. 26 (3). P. 309–335. doi: 10.1080/17797179.2017.1354578
8. Tanaka M., Hamada M., Iwata Y. Computation of a two-dimensional stress intensity factor by the boundary element method // Ingenieur-Archiv, 1982. V. 52. P. 95–104. doi: 10.1007/BF00536317
9. Cherepanov G.P. Some new applications of the invariant integrals of mechanics // Journal of Applied Mathematics and Mechanics. 2012. V. 76 (5). P. 519–536. doi: 10.1016/j.jappmathmech.2012.11.014
10. Rice J.R. A path independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks // Journal of Applied Mechanics. 1968. V. 35 (2). P. 379–386. doi: 10.1115/1.3601206
11. Kolednik O., Schöngundner R., Fischer F.D. A new view on J -integrals in elastic-plastic materials // International Journal of Fracture. 2014. V. 187 (1). P. 77–107. doi: 10.1007/s10704-013-9920-6
12. Huang K., Shimada T., Ozaki N., Hagiwara Y., Sumigawa T., Guo L., Kitamura T. A unified and universal Griffith-based criterion for brittle fracture // International Journal of Solids and Structures. 2017. V. 128. P. 67–72. doi: 10.1016/j.ijsolstr.2017.08.018

13. Prandtl L., Knauss W.G. A thought model for the fracture of brittle solids // *International Journal of Fracture*. 2011. V. 171 (2). P. 105–109. doi: 10.1007/s10704-011-9637-3
14. Ентов В.М., Салганик Р.Л. К модели хрупкого разрушения Прандтля // *Известия АН СССР. Механика твердого тела*. 1968. № 6. С. 87–99.
15. He X. A review of finite element analysis of adhesively bonded joints // *International Journal of Adhesion and Adhesives*. 2011. V. 31 (4). P. 248–264. doi: 10.1016/j.ijadhadh.2011.01.006
16. Новожилов В.В. О необходимом и достаточном критерии хрупкой прочности // *Прикладная математика и механика*. 1969. Т. 33, № 2. С. 212–222.
17. Морозов Н.Ф., Семенов Б.Н. Применение критерия хрупкого разрушения В.В. Новожилова при определении разрушающих нагрузок для угловых вырезов в условиях сложного напряженного состояния // *Известия АН СССР. Механика твердого тела*. 1986. № 1. С. 122–126.
18. Нейбер Г. Концентрация напряжений. М. ; Л. : ОГИЗ : Гостехиздат, 1947. 204 с.
19. Neuber H. *Theory of Notch Stresses: Principles for Exact Calculation of Strength with Reference to Structural Form and Material*. Berlin : Springer-Verlag, 1958. 180 p.
20. Назаров С.А., Паукито М.В. Дискретные модели и осреднение в задачах теории упругости. Л. : Изд-во Ленингр. ун-та, 1984. 93 с.
21. Морозов Е.М. ANSYS в руках инженера: механика разрушения. М. : Ленанд, 2010. 456 с.
22. Буццев А.Ю., Глаголев В.В., Маркин А.А. Исследование процесса локальной разгрузки элемента в конечно-элементном континууме // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2021. № 69. С. 86–96. doi: 10.17223/19988621/69/7
23. Berto F., Glagolev V.V., Markin A.A. Relationship between J_c and the dissipation energy in the adhesive layer of a layered composite // *International Journal of Fracture*. 2020. V. 224. P. 277–284. doi: 10.1007/s10704-020-00464-0
24. Andrews M.G., Massabo R. The effects of shear and near tip deformations on energy release rate and mode mixity of edge-cracked orthotropic layers // *Engineering Fracture Mechanics*. 2007. V. 74. P. 2700–2720. doi: 10.1016/J.ENGFRACMECH.2007.01.013

References

1. Griffith A.A. (1921) The phenomena of rupture and flow in solids. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A*. 221. pp. 163–189. doi: 10.1098/rsta.1921.0006
2. Cherepanov G.P. (1979) *Mechanics of Brittle Fracture*. New York: McGraw-Hill.
3. Murakami Y. (1992) *Stress Intensity Factors Handbook*. Pergamon Press.
4. Malik A.V., Lavit I.M. (2018) Metod rascheta koeffitsienta intensivnosti napryazheniy dlya nepodvizhnoy treshchiny normal'nogo razryva pri dinamicheskom nagruzhenii [On the computation method for the stress intensity factor of a stationary crack in mode I under dynamic loading]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 54. pp. 88–102. doi: 10.17223/19988621/54/8
5. Murakami Y. (1976) A simple procedure for the accurate determination of stress intensity factors by finite element method. *Engineering Fracture Mechanics*. 8(4). pp. 643–655. doi: 10.1016/0013-7944(76)90038-2
6. Rybicki E.F., Kanninen M.F. (1977) A finite element calculation of stress intensity factors by a modified crack closure integral. *Engineering Fracture Mechanics*. 9(4). pp. 931–938. doi: 10.1016/0013-7744(77)90013-3
7. Caicedo J., Portela A. (2017) Direct computation of stress intensity factors in finite element method. *European Journal of Computational Mechanics*. 26(3). pp. 309–335. doi: 10.1080/17797179.2017.1354578
8. Tanaka M., Hamada M., Iwata Y. (1982) Computation of a two-dimensional stress intensity factor by the boundary element method. *Ingenieur-Archiv*. 52. pp. 95–104. doi: 10.1007/BF00536317
9. Cherepanov G.P. (2012) Some new applications of the invariant integrals of mechanics. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*. 76(5). pp. 519–536. doi: 10.1016/j.jappmathmech.2012.11.014
10. Rice J.R. (1968) A path independent integral and the approximate analysis of strain concentration by notches and cracks. *Journal of Applied Mechanics*. 35(2). pp. 379–386. doi: 10.1115/1.3601206

11. Kolednik O., Schöngrundner R., Fischer F.D. (2014) A new view on J-integrals in elastic-plastic materials. *International Journal of Fracture*. 187(1). pp. 77–107. doi: 10.1007/s10704-013-9920-6
12. Huang K., Shimada T., Ozaki N., Hagiwara Y., Sumigawa T., Guo L., Kitamura T. (2017) A unified and universal Griffith-based criterion for brittle fracture. *International Journal of Solids and Structures*. 128. pp. 67–72. doi: 10.1016/j.ijsolstr.2017.08.018
13. Prandtl L., Knauss W.G. (2011) A thought model for the fracture of brittle solids. *International Journal of Fracture*. 171(2). pp. 105–109. doi: 10.1007/s10704-011-9637-3
14. Entov V.M., Salganik R.L. (1968) K modeli khрупкого razrusheniya Prandtlya [To the Prandtl model of brittle fracture]. *Izvestiya Akademii Nauk SSSR. Mekhanika Tverdogo Tela – Mechanics of Solids*. 6. pp. 87–99.
15. He X. (2011) A review of finite element analysis of adhesively bonded joints. *International Journal of Adhesion and Adhesives*. 31(4). pp. 248–264. doi: 10.1016/j.ijadhadh.2011.01.006
16. Novozhilov V.V. (1969) On a necessary and sufficient criterion for brittle strength. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*. 33(2). pp. 212–222. doi: 10.1016/0021-8928(69)90025-2
17. Morozov N.F., Semenov B.N. (1986) Primenenie kriteriya khрупкого razrusheniya V.V. Novozhilova pri opredelenii razrushayushchikh nagruzok dlya uglovykh vyrezov v usloviyakh slozhnogo napryazhennogo sostoyaniya [Application of the V.V. Novozhilov brittle fracture criterion when determining breaking loads for corner cutouts under conditions of complex stress state]. *Izvestiya akademii nauk SSSR. Mekhanika tverdogo tela – Mechanics of Solids*. 1. pp. 122–126.
18. Neuber H. (1937) *Kerbspannunglehre: Grunlagen fur Genaue Spannungsrechnung*. Berlin: Springer-Verlag.
19. Neuber H. (1958) *Theory of Notch Stresses: Principles for Exact Calculation of Strength with Reference to Structural Form and Material*. Berlin: Springer-Verlag.
20. Nazarov S.A., Pauksho M.V. (1984) *Diskretnye modeli i osrednenie v zadachakh teorii uprugosti* [Discrete models and averaging in problems of elasticity theory]. Leningrad: LGU.
21. Morozov E.M. (2010) *ANSYS v rukakh inzhenera: mekhanika razrusheniya* [ANSYS in the hands of an engineer: fracture mechanics]. Moscow: Lenand.
22. Burtsev A.Yu., Glagolev V.V., Markin A.A. (2021) Issledovanie protsessa lokal'noy razgruzki elementa v konechno-elementnom kontinuumе [Investigation of local unloading of an element in a finite element continuum]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 69. pp. 86–96. doi: 10.17223/19988621/69/7
23. Berto F., Glagolev V.V., Markin A.A. (2020) Relationship between J_c and the dissipation energy in the adhesive layer of a layered composite. *International Journal of Fracture*. 224. pp. 277–284. doi: 10.1007/s10704-020-00464-0
24. Andrews M.G., Massabo R. (2007) The effects of shear and near tip deformations on energy release rate and mode mixity of edge-cracked orthotropic layers. *Engineering Fracture Mechanics*. 74. pp. 2700–2720. doi: 10.1016/J.ENGFRACMECH.2007.01.013

Сведения об авторах:

Глаголев Вадим Вадимович – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой «Вычислительная механика и математика» Тульского государственного университета (Тула, Россия). E-mail: vadim@tsu.tula.ru

Лутхов Андрей Игоревич – аспирант кафедры «Вычислительная механика и математика» Тульского государственного университета (Тула, Россия). E-mail: tip460@mail.ru

Information about the authors:

Glagolev Vadim V. (Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Tula State University, Tula, Russian Federation). E-mail: vadim@tsu.tula.ru

Lutkhov Andrey I. (Tula State University, Tula, Russian Federation). E-mail: tip460@mail.ru

Статья поступила в редакцию 02.06.2023; принята к публикации 05.08.2024

The article was submitted 02.06.2023; accepted for publication 05.08.2024

Научная статья

УДК 539.3+620.178.1

doi: 10.17223/19988621/90/8

Исследование физико-механических свойств горячепрессованных композиционных керамик системы Hf-Ti-Cr-Fe-V-N

Николай Сергеевич Евсеев¹, Илья Александрович Жуков²,
Рауль Мубараков³, Иван Алексеевич Бельчиков⁴

^{1, 2, 3, 4} Томский государственный университет, Томск, Россия

^{1, 2} Институт проблем химико-энергетических технологий
Сибирского отделения РАН, Бийск, Россия

¹ evseevns@gmail.com

² gofra930@gmail.com

³ raul.mub@mail.ru

⁴ ivan70422@gmail.com

Аннотация. Рассмотрено влияние температурного режима процесса горячего прессования на структуру и свойства керамических образцов системы Hf-Ti-Cr-Fe-V-N . Высокоэнтропийные керамические материалы получены в режиме высокотемпературных экзотермических реакций с предварительной механической активацией порошковой смеси в планетарной мельнице. Получение компактных керамических образцов осуществлялось при помощи метода горячего прессования в диапазоне 1 300–1 450°C. Проведен рентгеноструктурный анализ полученной керамики и определены зависимости структуры, плотности и твердости образцов, спрессованных в различных температурных условиях. Максимальное значение твердости составило 1 858 ± 50 HV при температуре прессования 1 450°C.

Ключевые слова: керамика, твердость, горячее прессование, структура, плотность

Благодарности: Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-79-00144.

Для цитирования: Евсеев Н.С., Жуков И.А., Мубараков Р.Г., Бельчиков И.А. Исследование физико-механических свойств горячепрессованных композиционных керамик системы Hf-Ti-Cr-Fe-V-N // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2024. № 90. С. 90–102. doi: 10.17223/19988621/90/8

Original article

A study of the physical and mechanical properties of hot-pressed composite ceramics of the Hf–Ti–Cr–Fe–V–N system

Nikolay S. Evseev¹, Il'ya A. Zhukov²,
Raul' Mubarakov³, Ivan A. Bel'chikov⁴

^{1, 2, 3, 4} Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation

^{1, 2} Institute for Problems of Chemical and Energetic Technologies of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Biysk, Russian Federation

¹ evseevns@gmail.com

² gofra930@gmail.com

³ raul.mub@mail.ru

⁴ ivan70422@gmail.com

Abstract. The concept of synthesizing multicomponent (five or more components) systems in equiatomic or near-equiatomic percentages has opened a new class of materials, including high-entropy alloys (HEAs) and high-entropy ceramics (HEC). The composition of each element varies from 5 to 35 at.%. It is generally accepted that the exceptional performance of high-entropy materials is achieved through four “basic effects”: the high-entropy effect, the lattice distortion effect, the slow diffusion effect, and the “cocktail” effect. The properties of multicomponent systems are determined not only by the constituent elements, but also by the formation of phases. Thus, depending on the composition and methods of preparation and processing of the alloy, the ordered and disordered phases of the solid solution are formed in the HEAs. Both the atoms of individual elements and the resulting phases contribute to the properties of HEAs. They possess valuable properties such as high corrosion resistance, wear resistance, hardness, and other particular mechanical properties. This class of materials is under active scientific study, and the methods for their production, such as vacuum arc melting, selective laser melting, magnetron sputtering, are being developed. One of the promising and highly efficient methods for producing HEAs and HECs is self-propagating high-temperature synthesis (SHS). The main advantages of this method are high productivity, low energy consumption, environmental safety, regulation of the structure and properties of the final products, and synthesis mode control due to the possibility of selecting various combustion temperature and pressure values.

This study examines the effect of the temperature regime of the hot-pressing process on the structure and properties of ceramic samples of the Hf–Ti–Cr–Fe–V–N system. HEC materials are obtained as a result of high-temperature exothermic reactions with preliminary mechanical activation of the powder mixture in a planetary mill. The preparation of compact ceramic samples is carried out using the hot-pressing method in the temperature range of 1300–1450 °C. The X-ray diffraction analysis of the resulting samples allows one to determine the dependence of the structure, density, and hardness on the pressing temperature. The maximum hardness (1858±50 HV) is obtained at a pressing temperature of 1450 °C.

Keywords: ceramics, hardness, hot pressing, structure, density

Acknowledgments: This study was supported by the Russian Science Foundation (project No. 22-79-00144).

For citation: Evseev, N.S., Zhukov, I.A., Mubarakov, R., Bel'chikov, I.A. (2024) A study of the physical and mechanical properties of hot-pressed composite ceramics of the Hf–Ti–Cr–Fe–V–N system. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta*.

Введение

Концепция синтеза многокомпонентных систем (от пяти и выше) в эквиатомном или околоэквиатомном процентном содержании открыла новый класс материалов: высокоэнтروпийных сплавов (ВЭС) [1, 2] и высокоэнтропийной керамики (ВЭК) [3]. Состав каждого элемента варьирует от 5 до 35 ат. %. Принято считать, что исключительные характеристики высокоэнтропийных материалов достигаются за счет четырех «основных эффектов» [4]: эффекта высокой энтропии, эффекта искажения решетки, эффекта медленной диффузии и эффекта «коктейля». Следует отметить, что свойства многокомпонентных систем обусловлены не только составляющими элементами, но и образованием фаз. Так, в зависимости от состава, способа получения и обработки сплава в ВЭС образуются упорядоченные и неупорядоченные фазы твердого раствора. Как атомы отдельных элементов, так и образующиеся фазы вносят свой вклад в свойства ВЭС [5].

Высокоэнтропийные сплавы и керамики обладают такими многообещающими свойствами, как высокая коррозионная стойкость [6], высокая износостойкость [7], высокие значения твердости [8] и другие специальные механические свойства [9].

К настоящему моменту ВЭС- и ВЭК-системы на основе тугоплавких металлов (Nb, Mo, Hf, Ta, W) изучены мало, однако интерес к таким сплавам и керамикам, в составе которых присутствуют элементы Hf–Ti, проявляется все чаще. Так, в работе [10] показана принципиальная возможность получения высокоэнтропийного керамического композита (HfTiCN)–TiB₂ методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза. При этом *Ab initio* вычисления показали существование стабильного высокоэнтропийного соединения HfTiCN. В работе [11] детально исследован сплав TiZrHfVNb методом термодинамического моделирования с помощью программного обеспечения TERRA. Смоделированы температурные зависимости содержания компонентов твердого раствора и термодинамических характеристик системы. В работе [12] рассмотрены высокоэнтропийные керамические составы RE₂(Ce_{0,2}Zr_{0,2}Hf_{0,2}Sn_{0,2}Ti_{0,2})₂O₇ (RE₂HE₂O₇, RE = Y, Ho, Er, Yb), способные выступать в качестве новых термобарьерных покрытий с высокими коэффициентами теплового расширения, низкой теплопроводностью и высокой твердостью по Виккерсу (15 ГПа).

Значительная часть публикаций, затрагивающих вопросы получения, структуры и свойств высокоэнтропийной керамики, посвящена составам, включающим в себя карбиды, бориды и оксиды [13–16], при этом отмечается значительно меньшее количество сообщений о получении / структуре / свойствах ВЭК на основе нитридов. Одновременно с этим наблюдается интерес различных исследовательских групп к ВЭК (и покрытиям из ВЭК) на основе нитридов и карбонитридов [17–18], композиционных высокоэнтропийных нитридных керамических покрытий с высокими эксплуатационными характеристиками [19].

Цель работы – изучить влияние температурного режима процесса горячего прессования на структуру, плотность и твердость композиционной нитридной керамики системы Hf–Ti–Cr–Fe–V–N.

Материалы и методика эксперимента

В настоящей работе в качестве исходных порошковых компонентов использовались порошки Hf, Ti, Cr, FeV (характеристики которых отражены в табл. 1), а также газообразный азот (чистота 99.99%) и аргон (чистота 99.99%).

Таблица 1

Характеристики исходных порошковых компонентов

Исходные порошки	Дисперсность, мкм	Чистота, мас. %
Hf	≤ 50	≥ 99
FeV ₅₀	≤ 50	≥ 98
Ti	≤ 50	≥ 99
Cr	≤ 50	$\geq 99\%$

В исследовании [20] установлено, что оптимальное время механической активации порошковой смеси Hf–Ti–Cr–Fe–V в планетарной мельнице составляет порядка 120 мин. В настоящей работе были использованы высокоэнтропийные керамические материалы системы Hf–Ti–Cr–Fe–V–N, полученные в режиме высокотемпературных экзотермических реакций с предварительным активированием исходной смеси в планетарной мельнице в течение 120 мин [21].

Процесс получения высокоэнтропийного керамического материала с последующей его консолидацией представлен на рис. 1.

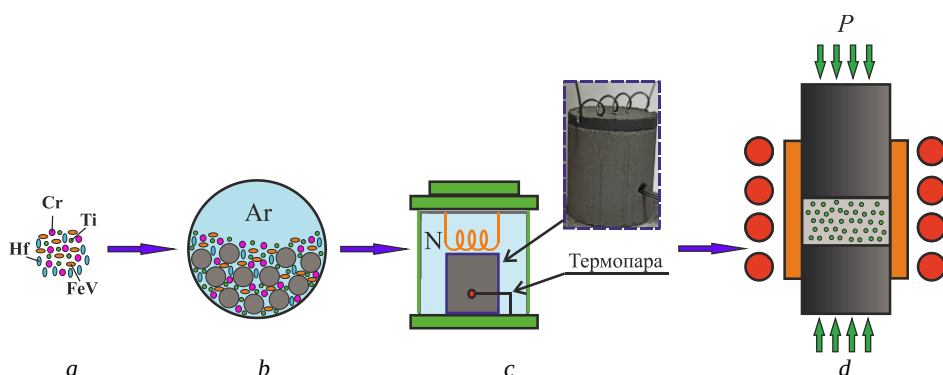


Рис. 1. Стадии получения керамических материалов системы Hf–Ti–Cr–Fe–V–N

Fig. 1. Stages of obtaining ceramic materials of the Hf–Ti–Cr–Fe–V–N system

Исходная порошковая смесь Hf–Ti–Cr–Fe–V (см. рис. 1, а) в эквимольном соотношении помещалась в барабан планетарной мельницы с соотношением масс мелющих металлических шаров и порошковой смеси 4:1. Далее проводилась механическая активация смеси при частоте вращения 14 Гц в среде аргона (см. рис. 1, b) в течение 120 мин. Получение высокоэнтропийной композиционной керамики системы Hf–Ti–Cr–Fe–V–N осуществлялось в режиме горения в условиях естественной фильтрации с использованием метода СВС в реакторе высокого давления в среде азота (см. рис. 1, c). Синтезированный материал Hf–Ti–Cr–Fe–V–N дробился, просеивался через сито с размером ячейки 50 мкм и использовался для получения керамических компактов (см. рис. 1, d). Гранулометрический состав

продуктов СВ-синтеза после дробления и просева представлен на рис. 2. Частицы продуктов СВ-синтеза имеют одномодальное распределение со средним объемным диаметром частиц 12.9 мкм.

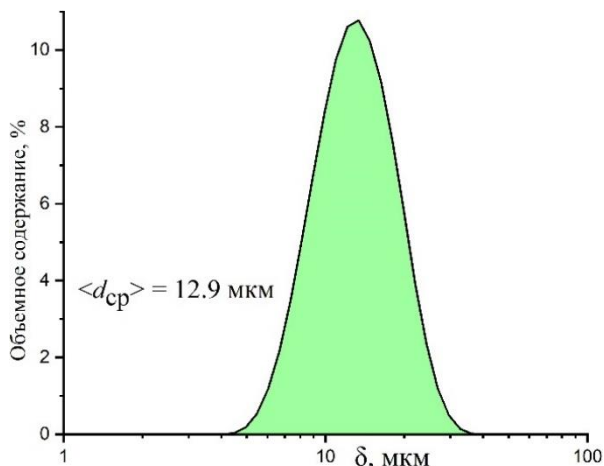


Рис. 2. Распределение частиц продуктов СВ-синтеза керамических материалов системы Hf–Ti–Cr–Fe–V–N по размерам

Fig. 2. Particle size distribution of SHS products of ceramic materials of the Hf–Ti–Cr–Fe–V–N system

Далее проводилась консолидация полученного материала методом горячего прессования (ГП) при температуре 1 300–1 450°C (см. рис. 1, d) и давлении 35 МПа в графитовой пресс-форме диаметром 10 мм. Метод «горячего прессования» широко используется при получении плотных материалов (в том числе керамик) и позволяет значительно сократить время термического цикла нагрев–выдержка–охлаждение, что, в свою очередь, позволяет замедлить рост зерен [22].

Микроструктуру керамических материалов определяли при помощи растрового электронного микроскопа Axia ChemiSEM (Thermo Fisher Scientific, USA) и сканирующего электронного микроскопа Tescan MIRA 3 LMU (Tescan Orsay Holding, Чехия), оснащенных энергодисперсионным спектрометром. Размер частиц горячепрессованных образцов определялся по СЭМ-снимкам методом секущих. Гранулометрический состав продуктов СВ-синтеза перед стадией горячего прессования определялся на лазерном анализаторе Analysette 22 (Fritsch, Германия) по теории Фраунгофера. Плотность консолидированных материалов измеряли методом гидростатического взвешивания по ГОСТ 24409–80 на аналитических весах (CAS XE-300, Республика Корея) с погрешностью делением (e) = 0,05 г. Твердость по Виккерсу определялась на микротвердомере PMT-3М при нагрузке 30 кг с временем выдержки 20 с.

Результаты и обсуждение

На рис. 3 приведены РЭМ-изображения микроструктуры с картированием по элементам синтезированной керамики системы Hf–Ti–Cr–Fe–V–N, полученной непосредственно после СВ-синтеза (СВС-стадия, см. рис. 1, c).

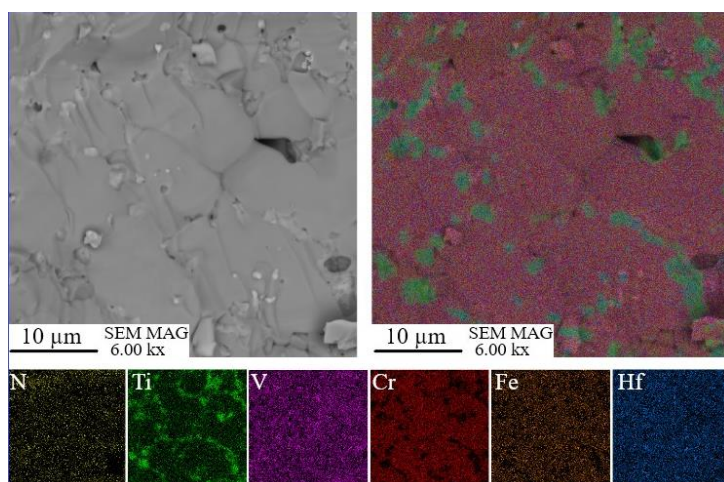


Рис. 3. РЭМ-изображение микроструктуры и многослойное ЭДС изображение продуктов СВ-синтеза системы Hf-Ti-Cr-Fe-V-N

Fig. 3. The SEM-EDS images of the microstructure and element mapping of SHS products of the Hf-Ti-Cr-Fe-V-N system

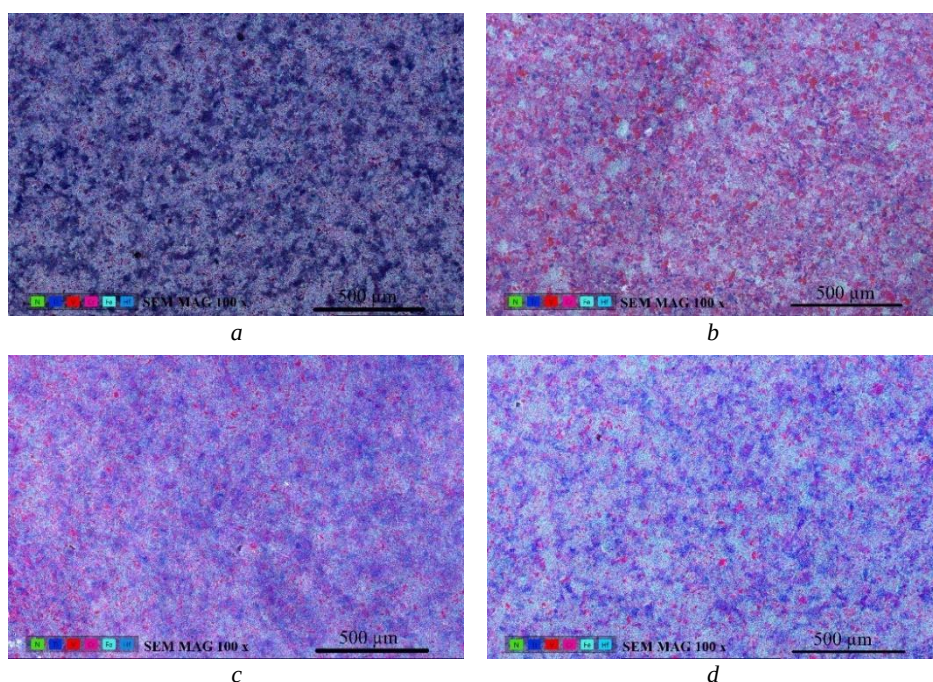


Рис. 4. РЭМ-изображение микроструктуры и многослойное ЭДС-изображение композиционной керамики системы Hf-Ti-Cr-Fe-V-N в зависимости от температуры горячего прессования: *a* – 1 300°C, *b* – 1 350°C, *c* – 1 400°C, *d* – 1 450°C

Fig. 4. The SEM-EDS images of the microstructure and element mapping of composite ceramics of the Hf-Ti-Cr-Fe-V-N system depending on hot-pressing temperature: (a) 1300, (b) 1350, (c) 1400, and (d) 1450 °C

Энергодисперсионный анализ подтвердил наличие композиционной структуры синтезированных образцов с образующими матрицу элементами Cr, Fe, V, Hf, Ti, N и дисперсионными включениями нитридов (Hf–Ti)N с содержанием в них (Cr, Fe, V) порядка 3–6 ат. % [21]. Измеренная средняя твердость спека на данном этапе получения составила $1\,344 \pm 30$ HV.

Многослойные ЭДС-изображения микроструктуры компактированных образцов после их консолидации методом ГП в зависимости от температуры прессования представлены на рис. 4.

Из рисунка видно, что композиционная структура наблюдается в образцах, полученных во всем рассматриваемом температурном диапазоне прессования. Тщательное исследование структуры полученных керамик подтвердило образование растворов (Hf, Ti, Cr, Fe, V)N, дисперсионно-упрочненных фазой (Ti, Hf)N. При этом более равномерное распределение компонентов наблюдается в образцах, полученных при температурах прессования 1 400 и 1 450 °C.

На рис. 5 приведены РЭМ-изображения микроструктуры горячепрессованных керамических образцов в зависимости от температуры прессования при 6 500-кратном увеличении.

Рисунок 6 отражает гранулометрический состав частиц композиционной керамики системы Hf–Ti–Cr–Fe–V–N в зависимости от температурного режима горячего прессования.

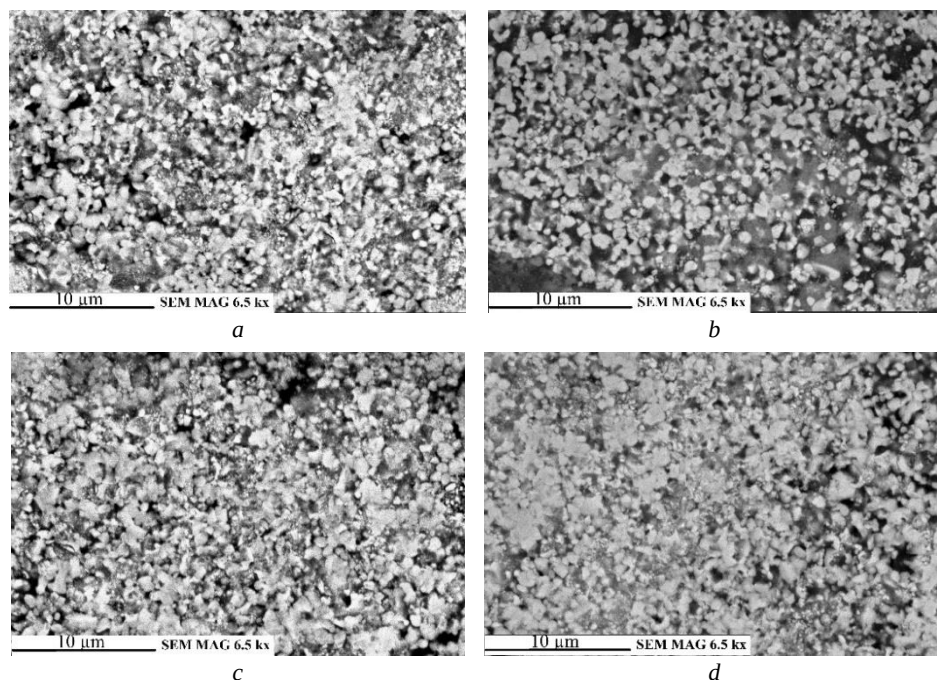


Рис. 5. РЭМ-изображение микроструктуры керамики в зависимости от температуры горячего прессования по размерам: *a* – 1 300 °C, *b* – 1 350 °C, *c* – 1 400 °C, (*d*) – 1 450 °C
Fig. 5. The SEM-EDS images of the microstructure and element mapping of composite ceramics of the Hf–Ti–Cr–Fe–V–N system depending on hot-pressing temperature by size: (*a*) 1300, (*b*) 1350, (*c*) 1400, and (*d*) 1450 °C

Исследование гранулометрического состава показало увеличение среднего диаметра частиц с 0.74 до 0.87 мкм при увеличении температуры спекания с 1 300 до 1 450°C. При этом в образцах, спеченных при температуре 1 400–1 450°C наблюдаются локальные следы плавления, в которых сплавленные частицы достигают 3–4 мкм (см. рис. 5).

В табл. 2 отражены значения плотности и твердости (среднее значение) полученных в процессе горячего прессования керамических материалов в среде аргона с временем выдержки 10 мин.

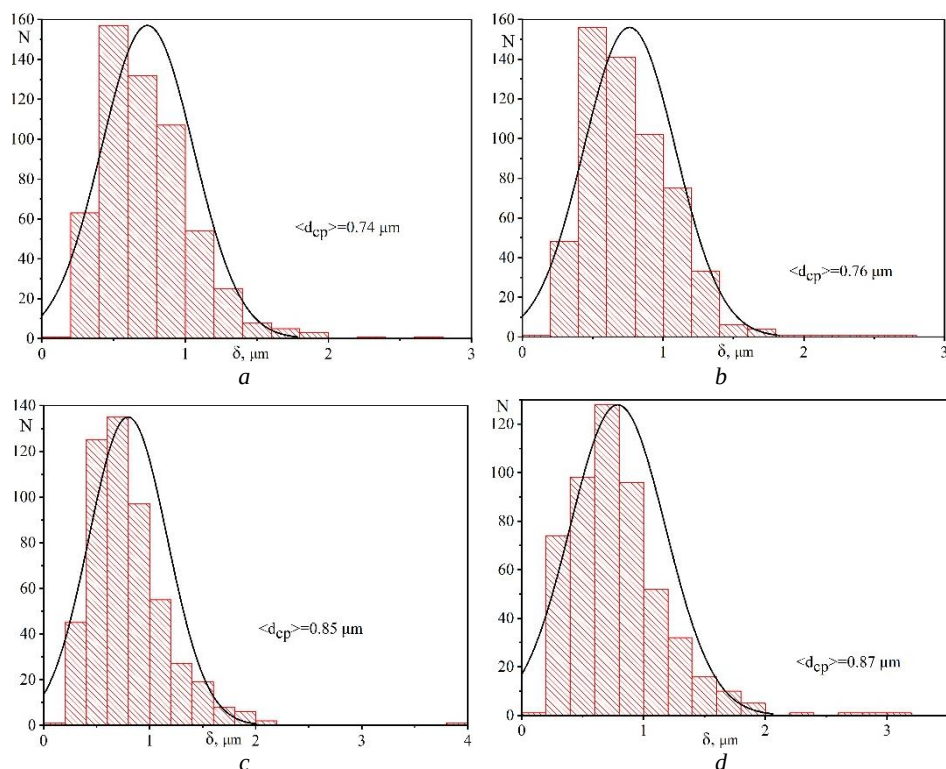


Рис. 6. Распределение частиц керамических материалов системы Hf–Ti–Cr–Fe–V–N в зависимости от температуры горячего прессования по размерам: *a* – 1 300°C, *b* – 1 350°C, *c* – 1 400°C, *d* – 1 450°C

Fig. 6. Particle distribution of ceramic materials of the Hf–Ti–Cr–Fe–V–N system depending on hot-pressing temperature by size: (*a*) 1300, (*b*) 1350, (*c*) 1400, and (*d*) 1450 °C

Таблица 2

Плотность и твердость керамических композиционных материалов системы Hf–Ti–Cr–Fe–V–N в зависимости от температуры горячего прессования

Температура горячего прессования, °C	Плотность, г/см ³	Твердость, HV
1 300	8.6 ± 0,05	1 247 ± 30
1 350	8.67 ± 0,05	1 424 ± 30
1 400	8.86 ± 0,05	1 678 ± 50
1 450	9.09 ± 0,05	1 858 ± 50

Анализ табл. 2 позволяет сделать заключение о том, что наибольшие значения плотности и твердости образцов достигаются при температуре прессования около 1 450°C. Очевидно, что при данном температурном режиме происходят наилучшее уплотнение материала и повышение механических характеристик.

Экспериментально установлено, что повышение температуры порядка 1 500°C приводит к жидкофазному плавлению образца, при котором часть образца вытекает сквозь технологические зазоры между пресс-формой и пуансонами, что приводило к разрушению пресс-форм при извлечении из них образцов.

Заключение

В работе рассмотрено влияние температурного режима процесса горячего прессования на структуру и свойства керамических образцов системы Hf–Ti–Cr–Fe–V–N. Анализ микроструктуры полученных композиционных керамик системы Hf–Ti–Cr–Fe–V–N показал наличие пористости во всем рассматриваемом температурном диапазоне прессования (1 300–1 450°C) при одномодальном распределении частиц исходной порошковой смеси с размером менее 50 мкм. При этом максимально достигнутое значение твердости составило $1\,858 \pm 50$ HV. Получению более плотных керамических структур с меньшим объемным содержанием пор могут способствовать использование исходной порошковой смеси с бимодальным гранулометрическим составом [23] и более тщательная корректировка режима горячего прессования. Экспериментально установлено, что наибольшим пределом прочности на изгиб обладают образцы, полученные при температуре горячего прессования 1 450°C.

Список источников

1. George E.P., Raabe D., Ritchie R.O. High-entropy alloys // *Nature reviews materials*. 2019. V. 4 (8). P. 515–534. doi: 10.1038/s41578-019-0121-4
2. Cantor B., Chang I.T.H., Knight P., Vincent A.J.B. Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys // *Materials Science and Engineering: A*. 2004. V. 375. P. 213–218. doi: 10.1016/j.msea.2003.10.257
3. Rost C.M., Sachet E., Borman T., Moballeggh A., Dickey E.C., Hou D., Jones J.L., Stefano Curtarolo S. Entropy-stabilized oxides // *Nature communications*. 2015. V. 6 (1). Art. 8485. doi: 10.1038/ncomms9485
4. Ye Y.F., Wang Q., Lu J., Liu C.T., Yang Y. High-entropy alloy: challenges and prospects // *Materials Today*. 2016. V. 19 (6). P. 349–362. doi: 10.1016/j.mattod.2015.11.026
5. Yeh J.W. Overview of high-entropy alloys // *High-entropy alloys: fundamentals and applications*. Springer, 2016. P. 1–19. doi: 10.1007/978-3-319-27013-5_1
6. Yan X., Guo H., Yang W., Pang S., Wang Q., Liu Y., Liaw P.K., Zhang T. Al_{0.3}Cr_xFeCoNi high-entropy alloys with high corrosion resistance and good mechanical properties // *Journal of Alloys and Compounds*. 2021. V. 860. Art. 158436. doi: 10.1016/j.jallcom.2020.158436
7. Joseph J., Haghdadi N., Shamlaye K., Hodgson P., Barnett M., Fabijanic D. The sliding wear behaviour of CoCrFeMnNi and Al_xCoCrFeNi high entropy alloys at elevated temperatures // *Wear*. 2019. V. 428. P. 32–44. doi: 10.1016/j.wear.2019.03.002
8. Kao Y.F., Chen T.J., Chen S.K., Yeh J.W. Microstructure and mechanical property of as-cast, -homogenized, and-deformed Al_xCoCrFeNi (0 ≤ x ≤ 2) high-entropy alloys // *Journal of Alloys and Compounds*. 2009. V. 488 (1). P. 57–64. doi: 10.1016/j.jallcom.2009.08.090

9. MacDonald B.E., Fu Z., Wang X., Li Z., Chen W., Zhou Y., Raabe D., Schoenung J., Hahn H., Lavernia E.J. Influence of phase decomposition on mechanical behavior of an equiatomic CoCuFeMnNi high entropy alloy // *Acta Materialia*. 2019. V. 181. P. 25–35. doi: 10.1016/j.actamat.2019.09.030
10. Evseev N.S., Matveev A.E., Nikitin P.Yu., Abzaev Yu.A., Zhukov I.A. A theoretical and experimental investigation on the SHS synthesis of (HfTiCN)-TiB₂ high-entropy composite // *Ceramics International*. 2022. V. 48 (11). P. 16010–16014. doi: 10.1016/j.ceramint.2022.02.144
11. Gelchinski B., Balyakin I., Ilinykh N., Rempel A. Analysis of the Probability of Synthesizing High-Entropy Alloys in the Systems Ti-Zr-Hf-V-Nb, Gd-Ti-Zr-Nb-Al, and Zr-Hf-V-Nb-Ni // *Physical Mesomechanics*. 2021. V. 24. P. 701–706. doi: 10.1134/S1029959921060084
12. Junjie H., Guo H., Jing L., Jingchao T. New class of high-entropy defect fluorite oxides RE₂(Ce_{0.2}Zr_{0.2}Hf_{0.2}Sn_{0.2}Ti_{0.2})₂O₇ (RE = Y, Ho, Er, or Yb) as promising thermal barrier coatings // *Journal of the European Ceramic Society*. 2021. V. 41 (12). P. 6080–6086. doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2021.05.044
13. Yan X., Constantin L., Lu Y., Silvain J.F., Nastasi M., Cui B. (Hf_{0.2}Zr_{0.2}Ta_{0.2}Nb_{0.2}Ti_{0.2})C high-entropy ceramics with low thermal conductivity // *Journal of the American Ceramic Society*. 2018. V. 101 (10). C. 4486–4491. doi: 10.1111/jace.15779
14. Harrington T.J., Gild J., Sarker P., Toher C., Rost C.M., Dippo O.F., McElfresh C., Kaufmann K., Marin E., Borowski L., Hopkins P.E., Luo J., Curtarolo S., Brenner D.W., Vecchio K.S. Phase stability and mechanical properties of novel high entropy transition metal carbides // *Acta Materialia*. 2019. V. 166. P. 271–280. doi: 10.1016/j.actamat.2018.12.054
15. Kanzamanova G.Z., Kinelovsky S.A., Kozulin A.A. Shaped-Charge Treatment Effects Accompanying the Formation of Hard Structure and New Phase States in Coatings on Titanium // *Behavior of Materials under Impact, Explosion, High Pressures and Dynamic Strain Rates*. Springer, 2023. P. 69–82. doi:10.1007/978-3-031-17073-7_5
16. Zhang Z., Zhuo S., Liu Y., Liu L., Ma Z. Phase structure, mechanical properties and thermal properties of high-entropy diboride (Hf_{0.25}Zr_{0.25}Ta_{0.25}Sc_{0.25})B₂ // *Journal of the European Ceramic Society*. 2022. V. 42 (13). C. 5303–5313. doi: 10.1111/jace.18751
17. Dippo O.F., Mesgarzadeh N., Harrington T.J., Schrader G.D., Vecchio K.S. Bulk high-entropy nitrides and carbonitrides // *Scientific reports*. 2020. V. 10 (1). Art. 21288. doi: 10.1038/s41598-020-78175-8
18. Jiang C., Li R., Wang X., Shang H., Zhang Y., Liaw P.K. Diffusion Barrier Performance of AlCrTaTiZr/AlCrTaTiZr-N High-Entropy Alloy Films for Cu/Si Connect System // *Entropy*. 2020. V. 22. Art. 234. doi: 10.3390/e22020234
19. Guo Y., Shang X., Liu Q. Microstructure and properties of in-situ TiN reinforced laser cladding CoCr₂FeNiTi_x high-entropy alloy composite coatings // *Surf. Coat. Technol.* 2018. V. 344. P. 353–358. doi: 10.1016/j.surfcoat.2018.03.035
20. Evseev N., Matveev A., Belchikov I., Zhukov I. Self-propagating high-temperature synthesis of high-entropy ceramic composition (Hf_{0.25}Ti_{0.25}Cr_{0.25}(FeV)_{0.25})N // *Materials Letters*. 2023. V. 346. Art. 134562. doi: 10.1016/j.matlet.2023.134562
21. Евсеев Н.С., Матвеев А.Е., Бельчиков И.А., Жуков И.А., Ворожцов А.Б., Мубараков Р.Г. Получение высокоэнтروпийных композитов на основе Hf-Ti-Cr-FeV-N в режиме высокотемпературных экзотермических реакций // *Известия вузов. Физика*. 2023. Т. 66, № 8 (789). С. 131–133. doi: 10.17223/00213411/66/8/15
22. Орданьян С.С., Несмелов Д.Д., Новоселов Е.С. Статистическая оценка механических характеристик горячепрессованной керамики в системе ZrB₂-SiC // *Вестник Томского государственного университета. Математика и механика*. 2023. № 82. С. 150–160. doi: 10.17223/19988621/82/12
23. Гордеев Ю.Н., Абкарян А.К., Ковалевская О.В. Перспективные композиционные материалы на основе сверхвысокомолекулярного полиэтилена, матрично-наполненные сверхтонкими порошками оксида алюминия // *Вестник Сибирского государственного аэрокосмического университета им. академика М.Ф. Решетнева*. 2011. № 1 (34). С. 128–132.

References

- George E.P., Raabe D., Ritchie R.O. (2019) High-entropy alloys. *Nature Reviews Materials*. 4. pp. 515–534. doi: 10.1038/s41578-019-0121-4
- Cantor B., Chang I.T.H., Knight P., Vincent A.J.B. (2004) Microstructural development in equiatomic multicomponent alloys. *Materials Science and Engineering: A*. 375. pp. 213–218. doi: 10.1016/j.msea.2003.10.257
- Rost C.M., Sachet E., Borman T., Moballeghe A., Dickey E.C., Hou D., Jones J.L., Stefano Curtarolo S. (2015) Entropy-stabilized oxides. *Nature Communications*. 6. Article 8485. doi: 10.1038/ncomms9485
- Ye Y.F., Wang Q., Lu J., Liu C.T., Yang Y. (2016) High-entropy alloy: challenges and prospects. *Materials Today*. 19. pp. 349–362. doi: 10.1016/j.mattod.2015.11.026
- Yeh J.W. (2016) Overview of high-entropy alloys. *High-Entropy Alloys: Fundamentals and Applications*. pp. 1–19. doi: 10.1007/978-3-319-27013-5_1
- Yan X., Guo H., Yang W., Pang S., Wang Q., Liu Y., Liaw P.K., Zhang T. (2021) $\text{Al}_{0.3}\text{Cr}_x\text{FeCoNi}$ high-entropy alloys with high corrosion resistance and good mechanical properties. *Journal of Alloys and Compounds*. 860. Article 158436. doi: 10.1016/j.jallcom.2020.158436
- Joseph J., Haghdadi N., Shamlaye K., Hodgson P., Barnett M., Fabijanic D. (2019) The sliding wear behaviour of CoCrFeMnNi and $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ high entropy alloys at elevated temperatures. *Wear*. 428. pp. 32–44. doi: 10.1016/j.wear.2019.03.002
- Kao Y.F., Chen T.J., Chen S.K., Yeh J.W. (2009) Microstructure and mechanical property of as-cast, homogenized, and deformed $\text{Al}_x\text{CoCrFeNi}$ ($0 \leq x \leq 2$) high-entropy alloys. *Journal of Alloys and Compounds*. 488. pp. 57–64. doi: 10.1016/j.jallcom.2009.08.09
- MacDonald B.E., Fu Z., Wang X., Li Z., Chen W., Zhou Y., Raabe D., Schoenung J., Hahn H., Lavernia E.J. (2019) Influence of phase decomposition on mechanical behavior of an equiatomic CoCuFeMnNi high entropy alloy. *Acta Materialia*. 181. pp. 25–35. doi: 10.1016/j.actamat.2019.09.030
- Evseev N.S., Matveev A.E., Nikitin P.Yu., Abzaev Yu.A., Zhukov I.A. (2022) A theoretical and experimental investigation on the SHS synthesis of $(\text{HfTiCN})\text{-TiB}_2$ high-entropy composite. *Ceramics International*. 48. pp. 16010–16014. doi: 10.1016/j.ceramint.2022.02.144
- Gelchinski B., Balyakin I., Ilinykh N., Rempel A. (2021) Analysis of the probability of synthesizing high-entropy alloys in the systems Ti-Zr-Hf-V-Nb , Gd-Ti-Zr-Nb-Al , and Zr-Hf-V-Nb-Ni . *Physical Mesomechanics*. 24. pp. 701–706. doi: 10.1134/S1029959921060084
- Junjie H., Guo H., Jing L., Jingchao T. (2021) New class of high-entropy defect fluorite oxides $\text{RE}_2(\text{Ce}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Hf}_{0.2}\text{Sn}_{0.2}\text{Ti}_{0.2})_2\text{O}_7$ ($\text{RE} = \text{Y, Ho, Er, or Yb}$) as promising thermal barrier coatings. *Journal of the European Ceramic Society*. 41. pp. 6080–6086. doi: 10.1016/j.jeurceramsoc.2021.05.044
- Yan X., Constantin L., Lu Y., Silvain J.F., Nastasi M., Cui B. (2018) $(\text{Hf}_{0.2}\text{Zr}_{0.2}\text{Ta}_{0.2}\text{Nb}_{0.2}\text{Ti}_{0.2})\text{C}$ high-entropy ceramics with low thermal conductivity. *Journal of the American Ceramic Society*. 101. pp. 4486–4491. doi: 10.1111/jace.15779
- Harrington T.J., Gild J., Sarker P., Toher C., Rost C.M., Dippo O.F., McElfresh C., Kaufmann K., Marin E., Borowski L., Hopkins P.E., Luo J., Curtarolo S., Brenner D.W., Vecchio K.S. (2019) Phase stability and mechanical properties of novel high entropy transition metal carbides. *Acta Materialia*. 166. pp. 271–280. doi: 10.1016/j.actamat.2018.12.054
- Kanzamanova G.Z., Kinelovsky S.A., Kozulin A.A. (2023) Shaped-charge treatment effects accompanying the formation of hard structure and new phase states in coatings on titanium. In: *Behavior of Materials under Impact, Explosion, High Pressures and Dynamic Strain Rates*. Germany: Springer. pp. 69–82. doi: 10.1007/978-3-031-17073-7_5
- Zhang Z., Zhua S., Liu Y., Liu L., Ma Z. (2022) Phase structure, mechanical properties and thermal properties of high-entropy diboride $(\text{Hf}_{0.25}\text{Zr}_{0.25}\text{Ta}_{0.25}\text{Sc}_{0.25})\text{B}_2$. *Journal of the European Ceramic Society*. 42. pp. 5303–5313. doi: 10.1111/jace.18751

17. Dippo O.F., Mesgarzadeh N., Harrington T.J., Schrader G.D., Vecchio K.S. (2020) Bulk high-entropy nitrides and carbonitrides. *Scientific Reports*. 10. Article 21288. doi: 10.1038/s41598-020-78175-8
18. Jiang C., Li R., Wang X., Shang H., Zhang Y., Liaw P.K. (2020) Diffusion barrier performance of AlCrTaTiZr/AlCrTaTiZr-N high-entropy alloy films for Cu/Si connect system. *Entropy*. 22(2). Article 234. pp. 1–13. doi: 10.3390/e22020234
19. Guo Y., Shang X., Liu Q. (2018) Microstructure and properties of in-situ TiN reinforced laser cladding CoCr₂FeNiTi_x high-entropy alloy composite coatings. *Surface and Coatings Technology*. 344. pp. 353–358. doi: 10.1016/j.surfcoat.2018.03.035
20. Evseev N., Matveev A., Belchikov I., Zhukov I. (2023) Self-propagating high-temperature synthesis of high-entropy ceramic composition (Hf_{0.25}Ti_{0.25}Cr_{0.25}(FeV)_{0.25})N. *Materials Letters*. 346. Article 134562. doi: 10.1016/j.matlet.2023.134562
21. Evseev N.S., Matveev A.E., Belchikov I.A., Zhukov I.A., Vorozhtsov A.B., Mubarakov R.G. (2023) Production of high-entropy composites based on Hf-Ti-Cr-FeV-N in the mode of high-temperature exothermic reactions. *Russian Physics Journal*. 66. pp. 131–133. doi: 10.17223/00213411/66/8/15
22. Ordan'yan S.S., Nesmelov D.D., Novoselov E.S. (2023) Statisticheskaya otsenka mekhanicheskikh kharakteristik goryachepressovannoy keramiki v sisteme ZrB₂-SiC [Statistical evaluation of mechanical characteristics of hot-pressed ceramics in ZrB₂-SiC system]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 82. pp. 150–160. doi: 10.17223/19988621/82/12
23. Gordeev Yu.N., Abkaryan A.K., Kovalevskaya O.V. (2011) Perspektivnye kompozitsionnye materialy na osnove sverkhvysokomolekulyarnogo polietilena, matrichno-napolnennye sverkh-tonkimi poroshkami oksida alyuminiya [Prospective composite materials based on ultrahigh molecular weight polyethylene modified with ultrafine powders of aluminum oxide]. *Vestnik Sibirskogo gosudarstvennogo aerokosmicheskogo universiteta im. akademika M.F. Reshetneva – Vestnik SibSAU. Aerospace Technologies and Control Systems*. 1. pp. 128–132.

Сведения об авторах:

Евсеев Николай Сергеевич – кандидат физико-математических наук, доцент кафедры прикладной аэромеханики Томского государственного университета (Томск, Россия); научный сотрудник Института проблем химико-энергетических технологий Сибирского отделения РАН (Бийск, Россия). E-mail: evseevns@gmail.com

Жуков Илья Александрович – доктор технических наук, заведующий лабораторией нанотехнологий металлургии Томского государственного университета (Томск, Россия); ведущий научный сотрудник Института проблем химико-энергетических технологий Сибирского отделения РАН (Бийск, Россия). E-mail: gofra930@gmail.com

Мубаракوف Рауль – инженер-исследователь лаборатории нанотехнологий металлургии Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: raul.mub@mail.ru

Бельчиков Иван Алексеевич – инженер-исследователь лаборатории нанотехнологий металлургии Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: ivan70422@gmail.com

Information about the authors:

Evseev Nikolay S. (Candidate of Physics and Mathematics, Associate Professor, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation; Researcher, Institute for Problems of Chemical and Energetic Technologies of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Biysk, Russian Federation). E-mail: evseevns@gmail.com

Zhukov Ilya A. (Doctor of Technical Sciences, Head of Laboratory, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation; Researcher, Institute for Problems of Chemical and Energetic

Technologies of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences, Biysk, Russian Federation). E-mail: gofra930@gmail.com

Mubarakov Raul' (Researcher, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: raul.mub@mail.ru

Bel'chikov Ivan A. (Researcher, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: ivan70422@gmail.com

Статья поступила в редакцию 12.04.2024; принята к публикации 05.08.2024

The article was submitted 12.04.2024; accepted for publication 05.08.2024

Научная статья

УДК 532.529.5

doi: 10.17223/19988621/90/9

Особенности коагуляции и дробления капель в газожидкостных турбулентных струях

Юрий Владимирович Зуев

*Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет),
Москва, Россия, yuri_zuev@bk.ru*

Аннотация. Показано, что в газокapельной струе на относительно небольшом расстоянии от сопла, практически не зависящем от начальной суммарной объемной концентрации капель, за счет взаимодействия капель происходит существенное изменение их компонентного состава, а далее доли компонентов в каплях остаются неизменными. При увеличении концентрации капель в начальном сечении струи пропорции между объемными концентрациями компонентов во всех каплях стремятся к пропорциям объемных концентраций капель выделенных фракций в начальном сечении струи.

Ключевые слова: двухфазная струя, капли, газ, коагуляция и дробление капель, математическая модель, результаты расчетов

Для цитирования: Зуев Ю.В. Особенности коагуляции и дробления капель в газожидкостных турбулентных струях // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2024. № 90. С. 103–118. doi: 10.17223/19988621/90/9

Original article

Features of the coagulation and fragmentation of drops in turbulent gas–liquid jets

Yuriy V. Zuev

*Moscow Aviation Institute (National Research University),
Moscow, Russian Federation, yuri_zuev@bk.ru*

Abstract. In this paper, the mass exchange between drops of various sizes resulting from their coagulation and fragmentation in a two-phase jet is studied. Drops are combined into classes, and the drops of the isolated classes are assumed to consist of pure substances (components) in the initial cross-section of the jet. When moving away from the nozzle due to interparticle interaction, other components appear in the drops of all classes. The study of the variation in the component composition of drops makes it possible to analyze the intensity of mass exchange between drops and the ratio between coagulation and fragmentation of drops. Calculations have shown that coagulation and fragmentation of the drops occur simultaneously in the jet, but coagulation prevails over fragmentation. At a short distance from the nozzle, a significant change is observed in the fraction of com-

ponents in the drops, and further their component composition remains constant. As the concentration of drops increases, the ratio between components in the drops tends to the ratio between the volume concentrations of the drops from the isolated classes in the initial cross-section of the jet.

Keywords: two-phase jet, drops, gas, coagulation and fragmentation of drops, mathematical model, calculation results

For citation: Zuev, Yu.V. (2024) Features of the coagulation and fragmentation of drops in turbulent gas–liquid jets. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 90. pp. 103–118. doi: 10.17223/19988621/90/9

Введение

Научный интерес к процессам, протекающим в газожидкостных струях, связан с широким использованием этих течений в технике: при распыливании топлива в камерах сгорания тепловых двигателей, в поливальных установках, химических реакторах, медицинском оборудовании и многих других областях. В частности, при тушении пожаров с использованием самолетов [1] формируется течение, по физической природе схожее с двухфазным струйным течением. Практически во всех устройствах используются двухфазные струи с начальной объемной концентрацией жидкости, превышающей 10^{-3} .

Решение любой прикладной задачи предполагает наличие соответствующих математических моделей процессов, протекающих в проектируемых изделиях. В настоящее время известно достаточно много моделей двухфазных турбулентных струй, которые можно разделить на две группы. К первой группе относятся математические модели, включающие осредненные по Рейнольдсу уравнения и полуэмпирические модели турбулентности, необходимые для замыкания системы этих уравнений. Осредненные уравнения непрерывной (газовой) фазы записываются в переменных Эйлера, а осредненные уравнения дискретной фазы (капель) – как в переменных Эйлера, так и в переменных Лагранжа. В качестве примера использования при описании движения капель метода Эйлера можно привести модель [2], а в качестве примера использования метода Лагранжа – модель [3]. В статье [4] в результате сравнения этих математических моделей делается вывод, что при описании движения капель с использованием методов Эйлера и Лагранжа получаются близкие результаты. В моделях второй группы, например, в модели [5], расчет параметров газовой фазы проводится методом прямого численного моделирования (DNS), при котором нестационарные уравнения Навье–Стокса, записанные для газовой фазы в переменных Эйлера, решаются на мелкой сетке, шаг которой должен быть порядка колмогоровского масштаба турбулентности; при этом модели турбулентности не используются. При записи уравнений, описывающих движение капель, применяется метод Лагранжа.

Многие известные математические модели двухфазных струй обладают общим недостатком, который ограничивает практическое использование этих моделей случаями небольшой концентрации капель; по оценкам авторов, эти модели могут использоваться при объемной концентрации капель, не превышающей 10^{-4} . В таких моделях соблюдается гипотеза сплошности среды и непрерывности ее деформации, но нарушается условие непрерывности распределения скоростей

и других параметров фаз в пространстве. Наличие разрыва параметров фаз на границах их раздела делает некорректным использование аппарата дифференциального исчисления, разработанного для непрерывных функций, при расчете двухфазных течений. Для того чтобы использование дифференциальных уравнений при описании двухфазных течений было правомерным, при выводе этих уравнений следует проводить осреднение по пространству. Отмеченный недостаток не позволяет исследовать ряд процессов (в частности, коагуляцию и дробление капель), протекающих в газожидкостных струях при большой концентрации капель. По этой причине существует достаточно большое количество публикаций, посвященных исследованию влияния фазовых превращений на параметры двухфазных струй (например, [2–4]), но практически отсутствуют работы, в которых изучаются особенности процессов коагуляции и дробления капель в этих струях.

При определенных условиях в газожидкостных течениях возможно столкновение капель, в результате которого изменяются их размер, скорость и концентрация, что, в свою очередь, приводит к изменению параметров газа. В публикациях, посвященных исследованию коагуляции и дробления капель, можно найти различные критерии, которые, по мнению авторов, дают возможность оценить интенсивность межчастичного взаимодействия и, следовательно, степень влияние этого взаимодействия на параметры течения. В частности, в статье [6] в качестве такого критерия предлагается использовать объемную концентрацию капель и учитывать межчастичное взаимодействие при величине этой концентрации, превышающей 10^{-3} . В нашей работе [7] проведено исследование влияния столкновений капель на характеристики газожидкостной струи в зависимости от суммарной объемной концентрации капель в ее начальном сечении (на срезе сопла). В результате этого исследования показано, что при объемной концентрации капель, не превышающей 10^{-4} , столкновения капель не влияют на распространение струи и их можно не учитывать. В диапазоне изменения начальной концентрации капель от 10^{-4} до 10^{-3} их коагуляция и дробление оказывают существенное влияние только на размер и концентрацию капель в струе; при этом пренебрежение столкновениями капель практически не влияет на скорость газа и оказывает незначительное влияние на скорость капель (до 6%). В данном диапазоне изменения начальной концентрации капель при расчете двухфазной струи можно пренебречь столкновениями капель, если целью расчета является определение скоростей фаз. При начальной концентрации капель в струе, превышающей 10^{-3} , коагуляция и дробление капель влияют на все параметры струи, и столкновениями капель в этом случае пренебрегать нельзя.

В данной работе исследуется массообмен между каплями различного размера при их взаимодействии в двухфазной струе. При этом используется математическая модель, которая является развитием модели, приведенной в [7]. В модернизированной математической модели непрерывной фазой является газ, а дискретной – капли жидкости, объединенные в F классов. Принимается, что капли одного класса f ($f = 1, 2, \dots, F$) имеют одинаковые диаметры D_f , скорости u_f , объемные концентрации α_f , плотности ρ_f и другие физические свойства. Капли могут состоять из нескольких компонентов k ($k = 1, 2, \dots, K$), имеющих объемную концентрацию ϕ_f^k . Под объемной концентрацией ϕ_f^k компонента k в капле класса f понимается отношение объема компонента k в капле класса f к объему этой капли. Расчет коагуляции и дробления капель проводится методом Лагранжа, при котором

фиксируется количество классов и прослеживается изменение размеров и других параметров капель. Принимается, что в начальном сечении струи имеется F классов капель, состоящих из веществ с одинаковыми физическими свойствами. При этом вещества капель помечаются индексом $k = f$, т.е. в каплях класса $f = 1$ присутствует только компонент $k = 1$, в каплях класса $f = 2$ – компонент $k = 2$ и т.д. Обмен массой при столкновениях капель приведет к тому, что капли каждого класса будут состоять из K компонентов в различных пропорциях. Прослеживание компонентного состава капель при их движении позволило получить более детальную информацию о процессах коагуляции и дробления капель в струе.

Математическая модель турбулентной газокapельной струи, использующаяся при расчетах

При выводе уравнений, описывающих двухфазную струю, в качестве исходных уравнений берутся микроуравнения в форме уравнений Навье–Стокса для макроскопических параметров фаз, которые осредняются по пространству с использованием методики Р.И. Нигматулина [8]. После этого проводится осреднение полученных уравнений по методике О. Рейнольдса [9]. На заключительном этапе вывода уравнений оценивается порядок их членов так же, как это делается для однофазных течений [9].

Система осредненных уравнений двухфазного струйного течения, дисперсионной фазой которого является газ, а дисперсной фазой – капли, объединенные в F классов и состоящие из K жидких компонентов, включает: уравнения баланса и движения фаз, уравнения, описывающие изменение диаметра капель класса f и их компонентного состава ϕ_f^k вследствие коагуляции и дробления, а также уравнения состояния фаз и уравнения, связывающие объемные концентрации фаз и объемные концентрации компонентов в каплях. Ввиду того, что уравнения движения фаз являются векторными, они записываются в проекциях на оси координат.

В случае стационарного осесимметричного течения эти уравнения в цилиндрической системе координат имеют следующий вид:

$$\frac{\partial}{\partial x} \alpha u + \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} y \alpha v = 0; \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \rho_f \alpha_f u_f + \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} y \rho_f (\alpha_f v_f + \langle \alpha'_f v'_f \rangle) = \left(\frac{dM_f}{dt} \right)_c; \quad (2)$$

$$\rho \alpha u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho \alpha v \frac{\partial u}{\partial y} = - \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} y \rho \alpha \langle u' v' \rangle - \sum_{f=1}^F F_{cfx}; \quad (3)$$

$$\frac{\partial p}{\partial y} = 0; \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \rho_f \alpha_f u_f \frac{\partial u_f}{\partial x} + \rho_f (\alpha_f v_f + \langle \alpha'_f v'_f \rangle) \frac{\partial u_f}{\partial y} = & - \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} y \rho_f \alpha_f \langle u'_f v'_f \rangle + \\ & + F_{cfx} + \sum_{j=1}^F \left(\frac{dM_{fj}}{dt} \right)_c (u_j - u_f); \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \rho_f \alpha_f u_f \frac{\partial v_f}{\partial x} + \rho_f \left(\alpha_f v_f + 2 \langle \alpha'_f v'_f \rangle \right) \frac{\partial v_f}{\partial y} = - \frac{\partial}{\partial x} \rho_f \left(\alpha_f \langle u'_f v'_f \rangle + \right. \\ \left. + u_f \langle \alpha'_f v'_f \rangle \right) - \frac{v_f}{y} \frac{\partial}{\partial y} y \rho_f \langle \alpha'_f v'_f \rangle - \frac{1}{y} \frac{\partial}{\partial y} y \rho_f \alpha_f \langle v_f'^2 \rangle + F_{cfy} + \\ + \sum_{j=1}^F \left(\frac{dM_{\bar{f}j}}{dt} \right)_c (v_j - v_f); \end{aligned} \quad (6)$$

$$\left(\frac{dD_f^3}{dx} \right)_c = \frac{6}{\pi u_f} \sum_{j=1}^f K_{\bar{f}j} e_{\bar{f}j} \Phi_{\bar{f}j} \alpha_j; \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\phi_f^k}{dx} \right)_c = \frac{6}{\pi u_f} \left[\frac{1}{D_f^3} \sum_{j=1}^f K_{\bar{f}j} e_{\bar{f}j} \alpha_j (\phi_j^k - \phi_f^k) + \right. \\ \left. + \sum_{j=f}^F K_{\bar{f}j} e_{\bar{f}j} \frac{\alpha_j}{D_j^3} (1 - \Phi_{\bar{f}j}) (\phi_j^k - \phi_f^k) \right]; \end{aligned} \quad (8)$$

$$p = \rho RT, \quad \rho_f = \sum_{k=1}^K \rho_k \phi_f^k; \quad (9)$$

$$\alpha + \sum_{f=1}^F \alpha_f = 1; \quad (10)$$

$$\sum_{k=1}^K \phi_f^k = 1. \quad (11)$$

В этих уравнениях: x и y – оси цилиндрической системы координат (ось x совпадает с осью струи, ось y нормальна ей); u и v – проекции скорости $\mathbf{W}$ на оси координат; α – объемная концентрация; p – давление; ρ – плотность; T – температура; R – газовая постоянная дисперсионной фазы; D_f и D_j – диаметры капель классов f и j ; ϕ_f^k – объемная концентрация компонента k в каплях класса f ; F_{cfx} и F_{cfy} – проекции силы сопротивления капель $\mathbf{F}_{cf}$ класса f [10] на оси координат x и y ; $K_{\bar{f}j}$, $e_{\bar{f}j}$, $\Phi_{\bar{f}j}$ – константа коагуляции, коэффициент захвата и коэффициент эффективности соударений капель классов f и j соответственно [10, 11]; $(dM_f/dt)_c$ – интенсивность изменения массы капель класса f в результате их взаимодействия с каплями других классов в единице объема среды в единицу времени; $(dM_{\bar{f}j}/dt)_c$ – интенсивность перехода массы дисперсной фазы из класса f в класс j в единице объема среды в единицу времени вследствие коагуляции и дробления. Параметры капель обозначаются индексами f и j , параметры компонентов жидкой фазы – индексом k , параметры газа индексов не имеют. Штрихами сверху обозначены пульсационные величины, их моменты корреляции – угловыми скобками.

Как отмечено выше, расчет коагуляции и дробления капель проводится методом Лагранжа. При этом принимается, что при столкновениях капель различного размера, заканчивающихся их слиянием, мелкие капли исчезают, а объем и масса крупных капель увеличиваются. Если в результате столкновений мелких капель («снарядов») с более крупными каплями («мишенями») эти капли дробятся, то все параметры «осколков» соответствуют параметрам «снарядов». При математическом описании межчастичного взаимодействия учитываются результаты работы [12],

в соответствии с которыми для каплей размером более 5 мкм можно пренебречь частотой их столкновений за счет пульсационных скоростей по сравнению с частотой столкновений за счет осредненных скоростей. Наши оценки порядка членов осредненных уравнений Навье–Стокса для струйных течений показали, что в этом случае можно рассчитывать коагуляцию и дробление капель в одномерной постановке, так как поперечные скорости капель существенно меньше их продольных скоростей. С учетом сделанных замечаний для членов уравнений (2), (5) и (6), описывающих коагуляцию и дробление капель, используются следующие выражения [11]:

$$\begin{aligned} \left(\frac{dM_f}{dt} \right)_c &= \frac{6\rho_f \alpha_f}{\pi} \left(\frac{1}{D_f^3} \sum_{j=1}^f K_{ff} e_{ff} \Phi_{ff} \alpha_j - \sum_{j=f}^F K_{ff} \Phi_{ff} e_{ff} \frac{\alpha_j}{D_j^3} \right); \\ \sum_{j=1}^F \left(\frac{dM_{ff}}{dt} \right)_c (u_j - u_f) &= \frac{6\rho_f \alpha_f}{\pi} \left[\frac{1}{D_f^3} \sum_{j=1}^f K_{ff} e_{ff} \alpha_j (u_j - u_f) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j=f}^F K_{ff} e_{ff} \frac{\alpha_j}{D_j^3} (1 - \Phi_{ff}) (u_j - u_f) \right]; \\ \sum_{j=1}^F \left(\frac{dM_{ff}}{dt} \right)_c (v_j - v_f) &= \frac{6\rho_f \alpha_f}{\pi} \left[\frac{1}{D_f^3} \sum_{j=1}^f K_{ff} e_{ff} \alpha_j (v_j - v_f) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{j=f}^F K_{ff} e_{ff} \frac{\alpha_j}{D_j^3} (1 - \Phi_{ff}) (v_j - v_f) \right]. \end{aligned}$$

Так как двухфазные турбулентные струи так же, как и однофазные струи, являются автомодельными, для замыкания системы осредненных уравнений (1)–(11) используются алгебраические выражения [7]

$$\begin{aligned} \langle u'_f v'_f \rangle &= -K_{uf} K_{vf} l^2 \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right| \frac{\partial u}{\partial y}; \quad \langle u' v' \rangle = -K_u K_v l^2 \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right| \frac{\partial u}{\partial y}; \\ \langle v'^2_f \rangle &= K_v^2 l \left(\frac{\partial u}{\partial y} \right)^2; \quad \langle \alpha'_f v'_f \rangle = -\frac{K_{vf} K_v}{Sc_T} l^2 \left| \frac{\partial u}{\partial y} \right| \frac{\partial \alpha_f}{\partial y}. \end{aligned} \quad (12)$$

В них: $K_u = u'/u'_0$, $K_v = v'/v'_0$, $K_{uf} = u'_f/u'_0$, $K_{vf} = v'_f/v'_0$; u'_0 и v'_0 – проекции пульсационной скорости газа, определяемые по формулам для однофазных струй; u' , v' , u'_f и v'_f – пульсационные скорости фаз в двухфазном потоке, определяемые с использованием модели турбулентности [13]; l – путь перемешивания Прандтля [14], связанный с макромасштабом и интегральным масштабом турбулентности [15].

Решение системы уравнений (1)–(12) проводится со следующими граничными условиями:

$$\begin{aligned} x=0: u &= u(y), \quad u_f = u_f(y), \quad v_f = v_f(y), \quad \alpha_f = \alpha_f(y), \\ y=\infty: u &= u_e, \quad u_f = u_{fe}, \quad v_f = 0, \quad \alpha_f = 0, \\ y=0: v &= 0, \quad v_f = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial u_f}{\partial y} = 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Индексом e обозначены параметры фаз на границе струи.

Метод решения системы уравнений (1)–(13) изложен в монографии [16]. Результаты валидации описанной выше математической модели двухфазной струи

с использованием экспериментальных данных [17], приведенные в статье [7], показали хорошее совпадение расчетов с данными эксперимента.

Результаты расчетов

Данная работа посвящена исследованию массообмена между каплями различного размера при их взаимодействии в двухфазной турбулентной струе. Методом исследования является математическое моделирование газокapельной струи, в которой возможны коагуляция и дробление капель. При проведении расчетов такой струи принимается, что ее дисперсионной фазой является воздух, а дисперсной фазой – капли, объединенные в пять классов с характерными размерами (диаметрами) 10, 30, 50, 70 и 90 мкм. Вещество капель состоит из пяти компонентов, объемная концентрация ϕ_f^k которых в каплях может меняться вследствие соударения капель, заканчивающихся их коагуляцией или дроблением. В начальном сечении струи $\phi_f^k = 1$ при $f = k$ и $\phi_f^k = 0$ при $f \neq k$, т.е. в этом сечении струи капли классов f состоят только из одного компонента $k = f$. Далее за счет межчастичного взаимодействия в каплях каждого класса появляются другие компоненты, и компонентный состав капель будет меняться при их движении; исследование динамики компонентного состава капель каждого класса дает возможность проанализировать интенсивность массообмена между каплями и соотношение между коагуляцией и дроблением отдельных капель. При этом считается, что физические характеристики всех компонентов одинаковы и соответствуют физическим характеристикам воды. Расчеты проводятся для пяти значений суммарной объемной концентрации капель в начальном сечении струи ($\alpha_{\Sigma 0} = 10^{-4}, 5 \cdot 10^{-4}, 10^{-3}, 2 \cdot 10^{-3}$ и $5 \cdot 10^{-3}$) в предположении, что концентрации всех классов капель равны ($\alpha_{f0} = \alpha_{\Sigma 0}/5$), т.е. между этими концентрациями соблюдается пропорция 1:1:1:1:1. Другие граничные условия имеют следующие значения: радиус сопла, из которого истекает струя, $R_0 = 25 \cdot 10^{-3}$ м; на его срезе скорость воздуха $u_0 = 100$ м/с, скорости капель всех классов $u_{f0} = 80$ м/с, температуры воздуха и капель $T_0 = T_{f0} = 300$ К; поля параметров фаз на срезе сопла принимаются равномерными; струя истекает в неподвижную воздушную среду с давлением $p = 10^5$ Па и температурой $T_e = 300$ К (индексом 0 обозначены радиус и параметры фаз в начальном сечении струи). При проведении расчетов в соответствии с рекомендациями [11] количество классов капель выбрано равным пяти.

На рис. 1, а в безразмерном виде показано изменение скоростей газа и капель вдоль оси струи при начальной суммарной объемной концентрации капель $\alpha_{\Sigma 0} = \sum \alpha_{f0}$, равной $2 \cdot 10^{-3}$. Обезразмеривание скоростей фаз проводится относительно скорости газа на срезе сопла: $\bar{u}_m = u_m/u_0$, $\bar{u}_{fm} = u_{fm}/u_0$, а расстояние от сопла x обезразмеривается относительно его радиуса R_0 : $\bar{x} = x/R_0$ (здесь и далее индексом m обозначаются параметры фаз на оси струи). Вследствие того, что в начальном сечении струи скорости капель меньше скорости газа, взаимодействие фаз приводит к увеличению скоростей капель на небольшом расстоянии от сопла, и чем меньше их размер, тем в большей степени это проявляется. После достижения каплями скорости газа их скорость начинает уменьшаться. При этом скорости капель больше скорости газа, и вследствие большей инерционности крупных капель их скорости превышают скорость мелких капель. Все отмеченное относится к каплям классов $f = 2-5$, а скорость капель класса $f = 1$ практически совпадает со скоростью газа.

Изменение скоростей фаз вдоль оси двухфазной струи при других концентрациях капель качественно не отличается от изображенного на рис. 1, *a*; наблюдается лишь количественное отличие, которое проявляется, в частности, в дальнобойности струи. Под дальнобойностью затопленной струи $x_{0.5u}$ понимается расстояние от сопла, на котором скорость газа равна половине его скорости на срезе сопла (в начальном сечении струи). Зависимость безразмерной дальнобойности струи $\bar{x}_{0.5u} = x_{0.5u}/R_0$ от начальной объемной концентрации капель α_{f0} в диапазоне ее изменения 10^{-4} – $5 \cdot 10^{-3}$ приведена на рис. 1, *b*.

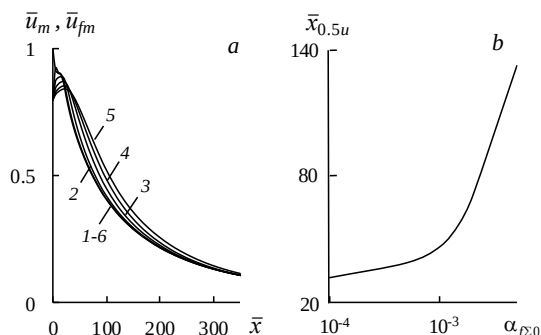


Рис. 1. Изменение скоростей фаз вдоль оси двухфазной струи при объемной концентрации капель в начальном сечении струи $\alpha_{f0} = 2 \cdot 10^{-3}$ и зависимость дальнобойности струи от этой концентрации: *a* – изменение скорости газа и капель вдоль оси струи; *b* – зависимость дальнобойности струи от начальной объемной концентрации капель. Кривые 1–5 – скорости капель пяти классов; 6 – скорость газа

Fig. 1. (a) Variation in the velocities of phases (gas-drops) along a two-phase jet axis for a volume concentration of drops in the initial section of the jet $\alpha_{f0} = 2 \cdot 10^{-3}$ and (b) dependence of the jet range on the initial volume concentration of drops. Curves 1–5 indicate velocities of drops of five classes; curve 6 indicates gas velocity

Из рис. 1 следует, что данная зависимость резко меняется при $\alpha_{f0} = 10^{-3}$. Это является следствием влияния объемной концентрации капель на все процессы, протекающие в двухфазных струях, в частности на коагуляцию и дробление капель. Поведение графика $\bar{x}_{0.5u} = \bar{x}_{0.5u}(\alpha_{f0})$ на рис. 1, *b* согласуется с рекомендациями, содержащимися в статьях [6, 7], в соответствии с которыми межчастичные взаимодействия при расчете двухфазных течений необходимо учитывать при $\alpha_{f0} > 10^{-3}$.

На рис. 2 представлены графики изменения объемных концентраций капель пяти классов вдоль оси струи, построенные по результатам расчетов, проведенных для трех значений начальной суммарной объемной концентрации капель (10^{-4} , $5 \cdot 10^{-4}$ и $2 \cdot 10^{-3}$) с учетом межчастичного взаимодействия (сплошные линии) и без учета этого взаимодействия (пунктирные линии).

Значения объемной концентрации отдельных классов капель обезразмеривались относительно значения их суммарной объемной концентрации в начальном сечении струи: $\bar{\alpha}_{fm} = \alpha_{fm}/\sum \alpha_{f0}$. Из графиков рис. 2 видно, что при начальной суммарной объемной концентрации капель 10^{-4} столкновения капель практически не влияют на концентрацию капель в струе. С увеличением α_{f0} влияние межчастичного взаимодействия на концентрацию капель в струе резко усиливается, причем концентрация мелких капель уменьшается, а концентрация крупных

капель увеличивается по сравнению со случаем отсутствия такого взаимодействия. Это указывает на то, что для капель всех классов коагуляция преобладает над дроблением, когда мелкие капли исчезают, а масса крупных капель увеличивается.

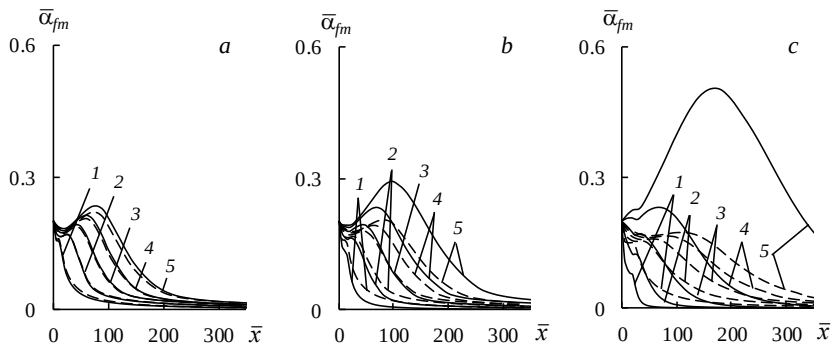


Рис. 2. Зависимости объемных концентраций капель пяти классов на оси струи от расстояния до сопла $\bar{x}$ при различных значениях объемной концентрации капель в начальном сечении струи α_{f0} : $a - 10^{-4}$; $b - 5 \cdot 10^{-4}$; $c - 2 \cdot 10^{-3}$. Кривые 1–5 – концентрации капель классов $f = 1-5$; сплошные линии – с учетом межчастичного взаимодействия; пунктирные линии – без учета этого взаимодействия

Fig. 2. Volume concentration of drops of five classes on a jet axis as a function of the distance to a nozzle $\bar{x}$ for various volume concentrations of drops in the initial section of the jet: $\alpha_{f0} = (a) 10^{-4}$, $(b) 5 \cdot 10^{-4}$, and $(c) 2 \cdot 10^{-3}$. Curves 1–5 indicate concentrations of drops of classes $f = 1-5$; with (solid lines) or with no (dashed lines) account for interaction of drops

Изменение диаметров капель отдельных классов для трех значений суммарной объемной концентрации капель на срезе сопла (10^{-4} , $5 \cdot 10^{-4}$ и $2 \cdot 10^{-3}$) показано на рис. 3. Видно, что увеличение начального значения суммарной концентрации капель приводит к более значительному увеличению диаметров крупных капель вдоль оси двухфазной струи; диаметры мелких капель изменяются незначительно. Это, так же как и изменение концентрации капель на оси струи (см. рис. 2), свидетельствует о том, что в струе коагуляция капель преобладает над их дроблением.

На рис. 4 приведены графики изменения объемных концентраций компонентов в каплях класса $f = 3$ вдоль оси двухфазной струи для трех значений суммарной объемной концентрации капель в начальном сечении струи $\alpha_{f0} = 10^{-4}$, $5 \cdot 10^{-4}$ и $2 \cdot 10^{-3}$.

Зависимости $\varphi_f^k = \varphi_f^k(\bar{x})$ для капель других классов аналогичны зависимостям на этом рисунке. Из рис. 4 следует, что на относительно небольшом расстоянии от сопла происходит существенное изменение величин долей компонентов в каплях, а затем доли компонентов остаются постоянными. Это расстояние практически не зависит от начальной концентрации капель и для заданных граничных условий примерно равно ста радиусам начального сечения струи. По мере увеличения концентрации α_{f0} соотношение между компонентами в каплях φ_3^k стремится к соотношению объемных концентраций капель выделенных классов в начальном сечении струи α_{f0} , т.е. – при проведении данного расчета – 1:1:1:1:1.

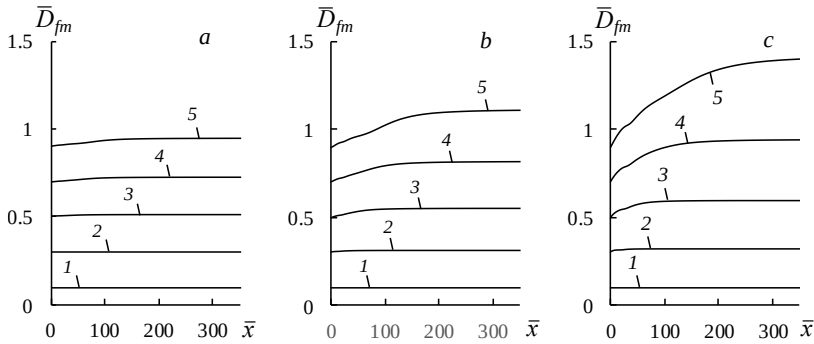


Рис. 3. Изменение диаметров капель выделенных классов вдоль оси двухфазной струи при различных значениях суммарной объемной концентрации капель в начальном сечении струи: *a* – $\alpha_{f20} = 10^{-4}$; *b* – $5 \cdot 10^{-4}$; *c* – $2 \cdot 10^{-3}$. Номера кривых соответствуют номерам классов капель

Fig. 3. Variation in the diameters of drops from the selected classes along a two-phase jet axis for various total volume concentrations of drops in the initial section of the jet: $\alpha_{f20} =$ (a) 10^{-4} , (b) $5 \cdot 10^{-4}$, and (c) $2 \cdot 10^{-3}$. Number notations of curves correspond to the numbers of drop classes

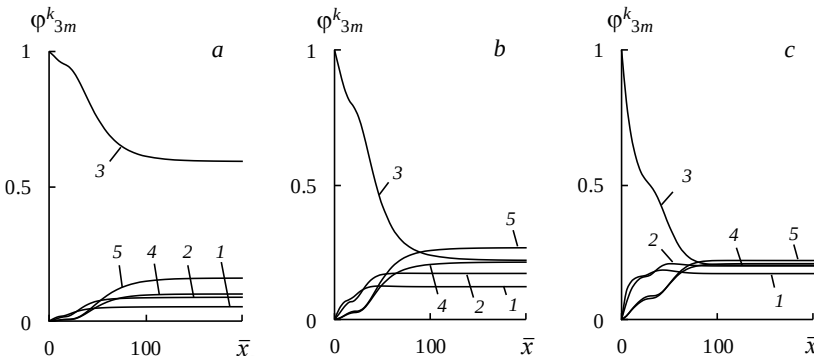


Рис. 4. Зависимости объемных концентраций компонентов в каплях класса $f = 3$ на оси струи от расстояния до начального сечения струи $\bar{x}$ при различных значениях начальной суммарной объемной концентрации капель α_{f20} : *a* – $\alpha_{f20} = 10^{-4}$; *b* – $5 \cdot 10^{-4}$; *c* – $2 \cdot 10^{-3}$. Номера кривых соответствуют номерам компонентов

Номера кривых соответствуют номерам компонентов

Fig. 4. Volume concentration of components in drops of class $f = 3$ on a jet axis as a function of distance to the initial section of the jet $\bar{x}$ for various initial total volume concentrations of drops: $\alpha_{f20} =$ (a) 10^{-4} , (b) $5 \cdot 10^{-4}$, and (c) $2 \cdot 10^{-3}$. Number notations of curves correspond to the numbers of components

С целью лучшего понимания процессов массообмена между каплями различного размера при их столкновениях в двухфазной струе результаты расчетов, представленные на рис. 4, приведены на рис. 5 в виде изменения по длине струи долей компонентов, которые они занимают в каплях класса $f = 3$.

В соответствии с принятой моделью межчастичного взаимодействия при столкновениях капель различного размера возможно их слияние или слияние с последующим делением на осколки (вероятность слияния определяется коэффициентом захвата e_{ff} , а вероятность дробления – коэффициентом эффективности соударений Φ_{ff}). Следовательно, независимо от исхода соударений после столк-

новения капель произойдет изменение их компонентного состава, и такое изменение будет определяться компонентным составом сталкивающихся капель. При этом компонентный состав капель классов $f = 2-4$ меняется как за счет их слияния с более мелкими каплями, так и за счет дробления более крупных капель. Состав капель класса $f = 1$ может меняться только за счет дробления более крупных капель, а состав капель класса $f = 5$ – только за счет коагуляции с более мелкими каплями.

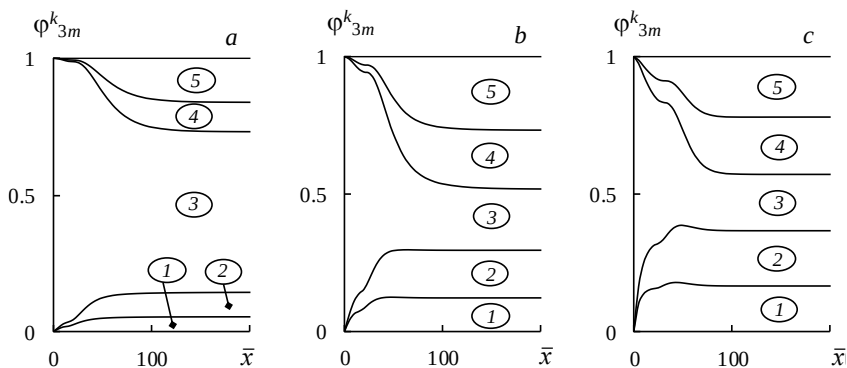


Рис. 5. Изменение вдоль оси струи долей компонентов, которые они занимают в каплях класса $f = 3$, для трех значений суммарной объемной концентрации капель в начальном сечении струи $\alpha_{\Sigma 0}$: $a - \alpha_{\Sigma 0} = 10^{-4}$; $b - 5 \cdot 10^{-4}$; $c - 2 \cdot 10^{-3}$. Цифры соответствуют номерам компонентов

Fig. 5. Variation in the fractions of components in drops of class $f = 3$ along a jet axis for various total volume concentrations of drops in the initial section of the jet: $\alpha_{\Sigma 0} = (a) 10^{-4}$, $(b) 5 \cdot 10^{-4}$, and $(c) 2 \cdot 10^{-3}$. Circled numbers correspond to the numbers of components

Согласно рис. 5, независимо от начальной концентрации капель в каплях класса $f = 3$ сумма объемных долей компонентов классов $k = 1, 5$ равна сумме объемных долей компонентов классов $k = 2, 4$. Это справедливо и для капель других классов. Из рис. 5 следует, что в струе одновременно протекают и коагуляция, и дробление капель, но при этом преобладает коагуляция капель, так как вдоль оси струи наблюдается увеличение диаметра капель (см. рис. 3). Этот вывод подтверждается и графиками рис. 2, на которых сравнивается изменение концентрации отдельных классов капель вдоль оси струи с учетом и без учета межчастичного взаимодействия: при учете этого взаимодействия концентрация мелких капель уменьшается (они поглощаются более крупными каплями), а концентрация крупных капель увеличивается за счет слияния с более мелкими каплями.

На рис. 6 показаны зависимости суммарной объемной концентрации капель $\alpha_{\Sigma m}$, коэффициента скольжения капель классов 1 и 5 ν_{1-5} и безразмерного среднего диаметра капель $\bar{D}_{32m}$ от расстояния до начального сечения струи. Перечисленные величины рассчитываются по следующим формулам: суммарная объемная концентрация капель: $\alpha_{\Sigma m} = \sum \alpha_{fm}$; коэффициент скольжения капель классов 1 и 5 $\nu_{1-5} = (u_{1m} - u_{5m})/u_{1m}$; средний объемно-поверхностный (заутеровский) диаметр $D_{32m} = \sum \alpha_{fm} / \sum (\alpha_{fm} / D_{fm})$. В качестве масштаба при обезразмеривании среднего диаметра капель принято его значение в начальном сечении струи. Следует отметить, что скорость капель класса $f = 1$ u_{1m} с большой точностью совпадает со скоростью газа.

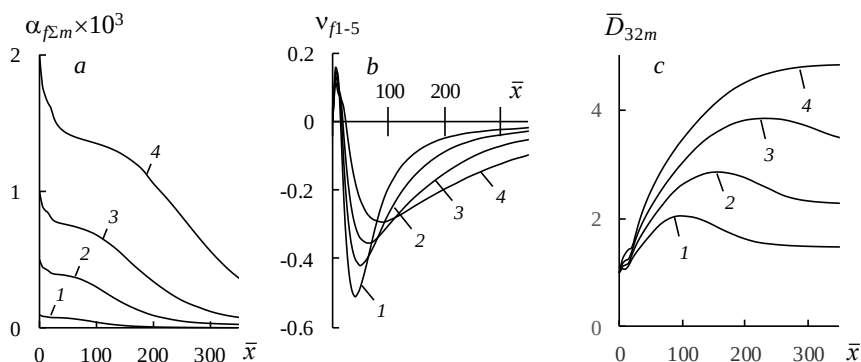


Рис. 6. Изменение вдоль оси двухфазной струи суммарной объемной концентрации капель, коэффициента скольжения капель классов $f = 1, 5$ и среднего диаметра капель при различных значениях начальной объемной концентрации капель $\alpha_{\Sigma 0}$: a – суммарная объемная концентрации капель $\alpha_{\Sigma m}$; b – коэффициент скольжения капель классов 1 и 5 v_{f1-5} ; c – средний диаметр капель $\bar{D}_{32m}$. Обозначения кривых: 1 – $\alpha_{\Sigma 0} = 10^{-4}$; 2 – $5 \cdot 10^{-4}$; 3 – 10^{-3} ; 4 – $2 \cdot 10^{-3}$

Fig. 6. Variation along a two-phase jet axis in the (a) total volume concentration of drops $\alpha_{\Sigma m}$, (b) slip coefficient of drops of classes $f = 1, 5$ v_{f1-5} , and (c) average diameter of drops $\bar{D}_{32m}$ at various initial volume concentrations of drops: $\alpha_{\Sigma 0} = (1) 10^{-4}$; (2) $5 \cdot 10^{-4}$; (3) 10^{-3} ; and (4) $2 \cdot 10^{-3}$

В соответствии с рис. 6, c при увеличении начальной суммарной концентрации капель $\alpha_{\Sigma 0}$ увеличиваются максимумы зависимостей $\bar{D}_{32m} = \bar{D}_{32m}(\bar{x})$, и эти максимумы смещаются в область больших значений $\bar{x}$. Увеличение средних диаметров капель на оси струи связано с увеличением концентрации капель $\alpha_{\Sigma m}$, которая сильно зависит от их начальной концентрации $\alpha_{\Sigma 0}$ (рис. 6, a). Интенсивность массообмена между каплями различных классов зависит от константы коагуляции K_{ff} , величина которой, в частности, определяется разностью скоростей соударяющихся капель. Сравнение графиков на рис. 6, b и рис. 6, c позволило выявить связь между значениями координаты $\bar{x}$, соответствующими максимальным средним диаметрам капель и минимальным радиусам кривизны линий $v_{f1-5} = v_{f1-5}(\bar{x})$: координаты $\bar{x}$, при которых достигаются максимальные значения средних диаметров капель, в 1.5 раза меньше координат, соответствующих минимальным радиусам кривизны линий на рис. 6, b в области $\bar{x} > 100$.

Кроме расчетов, результаты которых приведены на рис. 1–6, проведены расчеты двухфазной струи с объемными концентрациями классов капель в начальном сечении струи, составляющими пропорцию 1:2:4:2:1. Остальные граничные условия оставались без изменения. Результаты этих расчетов приведены на рис. 7. Из этого рисунка следует, что в данном случае при относительно большой начальной концентрации капель $\alpha_{\Sigma 0}$ соотношение между компонентами в каплях ϕ_3^k стремится к соотношению объемных концентраций капель классов в начальном сечении струи $\alpha_{\Sigma 0}$, т.е. – при проведении данного расчета – 1:2:4:2:1. Анализируя результаты расчетов, приведенных на рис. 4 и 7, можно сделать вывод, что при больших начальных концентрациях капель на небольшом расстоянии от сопла вследствие столкновения капель в струе происходит полное перемешивание веществ, из которых они первоначально состояли, и при этом пропорции объемов

этих веществ в каплях соответствуют пропорциям объемных концентраций капель выделенных классов в начальном сечении струи.

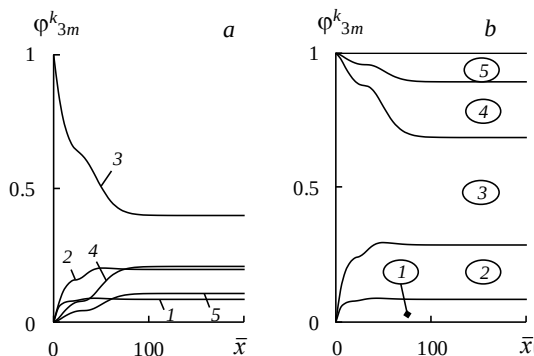


Рис. 7. Изменение вдоль оси двухфазной струи объемных концентраций компонентов и их долей в каплях класса $f = 3$ при начальной суммарной объемной концентрации капель $\alpha_{f=0} = 2 \cdot 10^{-3}$ и пропорции между концентрациями отдельных классов капель 1:2:4:2:1: a – изменение объемных концентраций компонентов; b – изменение долей компонентов.

Цифры соответствуют классам капель

Fig. 7. Variation along a two-phase jet axis in the (a) volume concentration of components and (b) fraction of components in drops of class $f = 3$ for the initial total volume concentration of drops $\alpha_{f=0} = 2 \cdot 10^{-3}$ and proportions between concentrations of separate drop classes of 1:2:4:2:1.

Circled numbers correspond to the numbers of drop classes

Заключение

С использованием математической модели газокapельной турбулентной струи, учитывающей межчастичные взаимодействия, проведено исследование массообмена между каплями различного размера вследствие их коагуляции и дробления. При этом капли объединяются в группы (классы) и принимается, что состав всех капель может быть многокомпонентным, причем количество компонентов равно количеству классов капель. Считается, что в начальном сечении струи (на срезе сопла) капли каждого класса состоят только из одного компонента, номер которого равен номеру класса капель, и физические характеристики всех компонентов одинаковы. По мере удаления от начального сечения струи за счет межчастичного взаимодействия в каплях каждого класса появляются другие компоненты, и компонентный состав капель меняется при их движении; исследование изменения компонентного состава капель выделенных классов позволило проанализировать интенсивность массообмена между каплями и соотношение между коагуляцией и дроблением капель выделенных классов.

Расчеты, проведенные для различных значений начальной суммарной объемной концентрации капель (на срезе сопла) $\alpha_{f=0}$ в диапазоне ее изменения 10^{-4} – $5 \cdot 10^{-3}$, показали, что при начальной суммарной объемной концентрации капель 10^{-4} столкновения капель практически не влияют на концентрацию капель в струе. С увеличением $\alpha_{f=0}$ влияние межчастичного взаимодействия на концентрацию капель в струе резко усиливается, причем концентрация мелких капель уменьшается, а концентрация крупных капель увеличивается по сравнению со случаем отсутствия такого взаимодействия. При этом происходит значительное увеличе-

ние диаметров крупных капель вдоль оси двухфазной струи, а диаметры мелких капель изменяются незначительно. Это указывает на то, что в струе с выбранными граничными условиями для капель всех классов коагуляция преобладает над дроблением, когда мелкие капли исчезают, а масса крупных капель увеличивается.

На относительно небольшом расстоянии от сопла происходит существенное изменение величин долей компонентов в каплях, а затем доли компонентов остаются неизменными. Это расстояние практически не зависит от начальной суммарной концентрации капель в струе и для заданных граничных условий примерно равно ста радиусам начального сечения струи. По мере увеличения концентрации α_{f0} соотношение между компонентами в каплях ϕ_f^k стремится к соотношению между объемными концентрациями капель выделенных классов в начальном сечении струи α_{f0} .

В результате анализа проведенных расчетов сделан вывод, что при больших начальных концентрациях капель, превышающих 10^{-3} , на небольшом расстоянии от сопла вследствие столкновения капель в струе происходит полное перемешивание веществ, из которых они первоначально состояли, и при этом пропорции объемов этих веществ в каплях соответствуют пропорциям объемных концентраций капель выделенных классов в начальном сечении струи. Также результаты расчетов указывают на то, что в струе одновременно протекают и коагуляция, и дробление капель, но коагуляция при заданных граничных условиях преобладает над дроблением.

Список источников

1. *Архипов В.А., Матвиенко О.В., Жарова И.К., Маслов Е.А., Перфильева К.Г., Булавко А.М.* Моделирование динамики жидко-капельного хладагента при авиационном тушении пожаров // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2019. № 62. С. 68–78. doi: 10.17223/19988621/62/6
2. *Пахомов М.А., Терехов В.И.* Численное исследование турбулентной структуры полидисперсной двухфазной струи с испаряющимися каплями // Математическое моделирование. 2016. Т. 28, № 11. С. 64–78.
3. *De S., Lakshmisha K.N.* Simulations of Evaporating Spray Jet in a Uniform Co-Flowing Turbulent Air Stream // International Journal of Spray and Combustion Dynamics. 2009. V. 1 (2). P. 169–198. doi: 10.1260/175682709788707459
4. *Mostafa A.A., Mongia H.C.* On the modeling of turbulent evaporating sprays: Eulerian versus Lagrangian approach // International Journal of Heat and Mass Transfer. 1987. V. 30 (12). P. 2583–2593. doi: 10.1016/0017-9310(87)90139-6
5. *Wang J., Dalla Barba F., Picano F.* Direct numerical simulation of an evaporation turbulent diluted jet-spray at moderate Reynolds number // International Journal of Multiphase Flow. 2021. V. 137 (5). Art. 103567. doi: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2021.103567
6. *Elghobashi S.* Particle-laden turbulent flows: direct simulation and closure models // Applied Scientific Research. 1991. V. 48 (3-4). P. 301–314. doi: 10.1007/BF02008202
7. *Зувев Ю.В.* Влияние коагуляции и дробления капель на параметры газокapпельной турбулентной струи // Ученые записки Казанского университета. Сер. Физико-математические науки. 2022. Т. 164, кн. 1. С. 85–100. doi: 10.2690-7/2541-7746.2022.85-100
8. *Нигматулин Р.И.* Динамика многофазных сред : в 2 ч. М. : Наука, 1987. Ч. 1.
9. *Хинце И.О.* Турбулентность, ее механизм и теория. М. : Физматгиз, 1963.
10. *Стернин Л.Е., Шрайбер А.А.* Многофазные течения газа с частицами. М. : Машиностроение, 1994.

11. Стернин Л.Е. Основы газодинамики двухфазных течений в соплах. М. : Машиностроение, 1974.
12. Friedlander S.K. Smoke, Dust and Haze: Fundamentals of Aerosol Behavior. New York : Wiley & Sons, 1977.
13. Зуев Ю.В., Лепешинский И.А., Решетников В.А., Истомин Е.А. Выбор критериев и определение их значений для оценки характера взаимодействия фаз в двухфазных турбулентных струях // Вестник МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. Машиностроение. 2012. № 1. С. 42–54.
14. Крашенинников С.Ю. К расчету осесимметричных закрученных и незакрученных турбулентных струй // Известия АН СССР. Механика жидкости и газа. 1972. № 3. С. 71–80.
15. Турбулентность. Принципы и применения / под ред. У. Фроста, Т. Моулдена. М. : Мир, 1980.
16. Шрайбер А.А., Гавин Л.Б., Наумов В.А., Яценко В.П. Турбулентные течения газовозвеси. Киев : Наукова думка, 1987.
17. Mostafa A.A., Mongia I.N., McDonell V.G., Samuelsen G.S. Evolution of Particle-laden Jet Flows: A Theoretical and Experimental Study // AIAA Journal. 1989. V. 27 (2). P. 167–183. doi: 10.2514/3.10079

References

1. Arkhipov V.A., Matvienko O.V., Zharova I.K., Maslov E.A., Perfil'eva K.G., Bulavko A.M. (2019) Modelirovanie dinamiki zhidko-kapel'nogo khladagenta pri aviatsionnom tushenii pozharov [Modeling of the dynamics of a liquid-droplet coolant under aerial firefighting]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 62. pp. 68–78. doi: 10.17223/19988621/62/6
2. Pakhomov M.A., Terekhov V.I. (2016) Chislennoe issledovanie turbulentnoy struktury polidispersnoy dvukhfaznoy strui s isparayushchimisya kaplyami [Numerical simulation of turbulent flow in a polydispersed two-phase jet with evaporating droplets]. *Matematicheskoe modelirovanie – Mathematical Models and Computer Simulations*. 28(11). pp. 64–78.
3. De S., Lakshmisha K.N. (2009) Simulations of evaporating spray jet in a uniform co-flowing turbulent air stream. *International Journal of Spray and Combustion Dynamics*. 1(2). pp. 169–198. doi: 10.1260/175682709788707459
4. Mostafa A.A., Mongia H.C. (1987) On the modeling of turbulent evaporating sprays: Eulerian versus Lagrangian approach. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 30(12). pp. 2583–2593. doi: 10.1016/0017-9310(87)90139-6
5. Wang J., Dalla Barba F., Picano F. (2021) Direct numerical simulation of an evaporating turbulent diluted jet-spray at moderate Reynolds number. *International Journal of Multiphase Flow*. 137. Article 103567. doi: 10.1016/j.ijmultiphaseflow.2021.103567
6. Elghobashi S. (1991) Particle-laden turbulent flows: direct simulation and closure models. *Applied Scientific Research*. 48(3–4). pp. 301–314. doi: 10.1007/BF02008202
7. Zuev Yu.V. (2022) Vliyanie koagulyatsii i drobleniya kapel' na parametry gazokapel'noy turbulentnoy strui [The impact of coagulation and division of drops on the parameters of the gas-drop turbulent jet]. *Uchenye zapiski Kazanskogo universiteta. Seriya fiziko-matematicheskie nauki*. 164(1). pp. 85–100. doi: 10.26907/2541-7746.2022.1.85-100
8. Nigmatulin R.I. (1990) *Dynamics of Multiphase Medium*. Volume 1. New York: Hemisphere Publishing Corporation.
9. Hinze J.O. (1959) *Turbulence. An Introduction to its Mechanism and Theory*. New York: McGraw-Hill.
10. Sternin L.E., Shrayber A.A. (1994) *Mnogofaznye techeniya gaza s chastitsami* [Multiphase flows of gas with particles]. Moscow: Mashinostroenie.
11. Sternin L.E. (1974) *Osnovy gazodinamiki dvukhfaznykh techeniy v soplakh* [Fundamentals of gas dynamics of two-phase flows in nozzles]. Moscow: Mashinostroenie.

12. Friedlander S.K. (1977) *Smoke, Dust and Haze: Fundamentals of Aerosol Behavior*. New York: Wiley & Sons.
13. Zuev Yu.V., Lepeshinskiy I.A., Reshetnikov V.A., Istomin E.A. (2012) Vybor kriteriev i opredelenie ikh znacheniy dlya otsenki kharaktera vzaimodeystviya faz v dvukhfaznykh turbulentnykh struyakh [The choice of criteria and determination of their values for assessment of phase interaction behavior in two-phase turbulent jets]. *Vestnik MGTU im. N.E. Baumana. Seriya «Mashinostroenie» – Herald of the Bauman Moscow State Technical University. Series Mechanical Engineering*. 1. pp. 42–54.
14. Krashenninikov S.Yu. (1972) Calculation of axisymmetric swirling and non-swirling turbulent jets. *Fluid Dynamics*. 7. pp. 426–433. doi: 10.1007/BF01209047
15. Edited by W. Frost, T. Moulden (1977) *Handbook of Turbulence. Volume 1. Fundamentals and Applications*. New York – London: Plenum Press.
16. Shrayber A.A., Gavin L.B., Naumov V.A., Yatsenko V.P. (1987) *Turbulentnye techeniya gazovzvesi* [Turbulent flows of a gas mixture]. Kyiv: Naukova Dumka.
17. Mostafa A.A., Mongia I.N., McDonell V.G., Samuelsen G.S. (1989) Evolution of particle-laden jet flows: a theoretical and experimental study. *AIAA Journal*. 27(2). pp. 167–183. doi: 10.2514/3.10079

Сведения об авторе:

Зуев Юрий Владимирович – доктор технических наук, профессор, профессор кафедры «Теория воздушно-реактивных двигателей» Московского авиационного института (национального исследовательского университета) (Москва, Россия). E-mail: yuri_zuev@bk.ru

Information about the author:

Zuev Yuriy V. (Doctor of Technical Sciences, Professor, Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, Russian Federation). E-mail: yuri_zuev@bk.ru

Статья поступила в редакцию 10.06.2023; принята к публикации 05.08.2024

The article was submitted 10.06.2023; accepted for publication 05.08.2024

Научная статья

УДК 532.5.032

doi: 10.17223/19988621/90/10

Моделирование трехмерного поля скорости в барабанной вращающейся печи

Валерия Валерьевна Ким¹, Владимир Николаевич Брендаков²

¹ Томский государственный университет, Томск, Россия

¹ Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН,
Томск, Россия

² Северский технологический институт – филиал НИЯУ «МИФИ», Северск, Россия

¹ kimvaleriia@mail.ru

² vnbrendakov@mephi.ru

Аннотация. Представлены результаты расчета гидродинамического поля в барабанной вращающейся печи. Численное решение математической модели течения несжимаемой среды получено методом конечно-разностного анализа. Адекватность построенной математической модели обоснована сравнением результатов расчета с известным аналитическим решением. Результаты численного моделирования хорошо согласуются с экспериментальными данными, что свидетельствует об эффективности выбранного подхода и корректности полученных результатов.

Ключевые слова: математическое моделирование, полиуронат аммония, термическое разложение, барабанная вращающаяся печь, течение в трубе

Благодарности: Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2022-0003.

Для цитирования: Ким В.В., Брендаков В.Н. Моделирование трехмерного поля скорости в барабанной вращающейся печи // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2024. № 90. С. 119–129. doi: 10.17223/19988621/90/10

Original article

Modeling of a three-dimensional velocity field in a rotary drum furnace

Valeriya V. Kim¹, Vladimir N. Brendakov²

¹ Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation

¹ Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch
of the Russian Academy of Sciences (ISPMS), Tomsk, Russian Federation

² Seversk Technological Institute – a branch of the National Research
Nuclear University MEPhI, Seversk, Russian Federation

¹ kimvaleriia@mail.ru² vnbrendakov@mephi.ru

Abstract. This paper deals with the problem of laminar axisymmetric incompressible flow in the working area of a rotary drum furnace. A system of second-order partial differential equations is derived and solved numerically using the finite difference method. The obtained solutions are tested for mesh convergence and compared with available analytical solutions for a laminar axisymmetric flow.

The numerical results show that furnace rotation significantly affects the gas flow in the working section of the apparatus. Thus, the temperature distribution over the working area and furnace surface can be controlled through the furnace rotation velocity and gas flow rate. The input velocity profile also affects the flow pattern in the furnace. Vortex zones with counterflow occur near the walls, where the axial velocity profile is more elongated than the Poiseuille parabola. On the symmetry axis, the axial velocity is higher than that of the Poiseuille flow.

The proposed mathematical model allows one to calculate more accurately the degree of thermal decomposition as a function of temperature and longitudinal coordinate along the furnace axis.

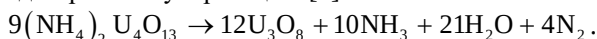
Keywords: mathematical modeling, ammonium polyuranate, thermal decomposition, rotary drum furnace, pipe flow

Acknowledgments: This work was carried out according to the state assignment for ISPMS SB RAS (project No. FWRW-2022-0003).

For citation: Kim, V.V., Brendakov, V.N. (2024) Modeling of a three-dimensional velocity field in a rotary drum furnace. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 90. pp. 119–129. doi: 10.17223/19988621/90/10

Введение

Атомная энергетика является одним из перспективных направлений получения тепловой и электрической энергии в современных условиях. При реализации ядерного топливного цикла для подготовки исходного сырья для топливных таблеток возникает необходимость получения оксидов урана ядерной чистоты. Наиболее часто для этих целей используют процесс экстракционного аффинажа с применением трибутилфосфата. Урановую руду растворяют азотной кислотой, в результате экстракционной очистки с использованием трибутилфосфата получают раствор реэкстракта урана $\text{UO}_2(\text{NO}_3)_2$ ядерной чистоты. Раствор $(\text{NH}_4)_2\text{U}_4\text{O}_{13} \times 5\text{H}_2\text{O}$ концентрируют и осаждают. После фильтрации осадок прокаливают в барабанной вращающейся печи до образования оксидов урана U_3O_8 . Процесс термического разложения полиураната аммония до оксидов урана представляет собой необратимую эндотермическую реакцию [1]



Эта реакция состоит из шести последовательно-параллельных стадий [2]. Степень термического разложения полиураната аммония в барабанной вращающейся печи зависит от температурного поля, формируемого в рабочей зоне аппарата [3]. Существенное влияние на тепловую обстановку оказывает гидродинамика проточного газа азота внутри барабанной вращающейся печи.

В работе рассматривается задача течения ламинарной, осесимметричной несжимаемой среды в рабочей зоне барабанной вращающейся печи. Полученная система дифференциальных уравнений второго порядка в частных производных решалась численно с помощью метода конечных разностей. Получаемые решения проверялись на сеточную сходимость и сравнивались с имеющимися аналитическими решениями ламинарного, осесимметричного течения.

Математическая постановка задачи

В качестве объекта исследования был выбран аппарат, используемый на Сибирском химическом комбинате (рис. 1). Он представляет собой цилиндрическую трубу радиусом $R = 0.3$ м и длиной $L = 8$ м, расположенную под углом наклона 2° к горизонту. Рабочая зона печи вращается с постоянной угловой скоростью $W = 0.35$ рад/с.

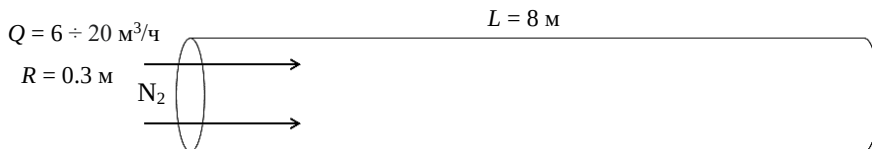


Рис. 1. Схема рабочей зоны барабанной вращающейся печи
Fig. 1. Scheme of the working area in a rotary drum furnace

При продувке барабанной печи нагретым азотом повышается количество урана в выходном продукте по сравнению с проведением того же процесса при продувке барабанной печи воздухом. Кроме этого, происходит увеличение скорости термического разложения и снижаются энергетические затраты на 25% [4]. Расход инертного газа для продувки печи варьирует в диапазоне $Q = 0.0017\text{--}0.0055$ м³/сек. Влияние гидродинамики газового потока внутри аппарата на технологический процесс очевидно. Задача является актуальной.

В работе рассматривается задача о стационарном ламинарном, осесимметричном течении несжимаемой вязкой среды. Исходная система уравнений Навье–Стокса записывается в цилиндрической системе координат [5]:

$$\begin{aligned} V_r \frac{\partial V_\varphi}{\partial r} + V_z \frac{\partial V_\varphi}{\partial z} + \frac{V_r V_\varphi}{r} &= \nu \left(\frac{\partial^2 V_\varphi}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 V_\varphi}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial V_\varphi}{\partial r} - \frac{V_\varphi}{r^2} \right), \\ V_r \frac{\partial V_r}{\partial r} + V_z \frac{\partial V_r}{\partial z} - \frac{V_\varphi^2}{r} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial r} + \nu \left(\frac{\partial^2 V_r}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 V_r}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial V_r}{\partial r} - \frac{V_r}{r^2} \right), \\ V_r \frac{\partial V_z}{\partial r} + V_z \frac{\partial V_z}{\partial z} &= -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} + \nu \left(\frac{\partial^2 V_z}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 V_z}{\partial z^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial V_z}{\partial r} \right), \\ \frac{\partial V_r}{\partial r} + \frac{\partial V_z}{\partial z} + \frac{V_r}{r} &= 0. \end{aligned}$$

Таким образом, имеем систему из четырех уравнений для четырех неизвестных V_r , V_φ , V_z , p . Для получения единственности решения исходную систему дифференциальных уравнений второго порядка в частных производных необходимо дополнить соответствующими граничными и начальными условиями.

На боковой поверхности рассматриваемого объема ставятся условия прилипания для всех компонент вектора скорости:

$$V_r = 0; V_z = 0; V_\phi = R \cdot \omega.$$

На входе в рабочую область задавался ударный профиль для компоненты вектора скорости V_z , для всех остальных переменных выбирались мягкие условия установления в виде равенства нулю первой производной по нормали к входу:

$$V_z = 1; \frac{\partial V_r}{\partial z} = 0; \frac{\partial V_\phi}{\partial z} = 0.$$

На выходе из расчетной области выбирались условия установления для всех переменных:

$$\frac{\partial V_z}{\partial z} = 0; \frac{\partial V_r}{\partial z} = 0; \frac{\partial V_\phi}{\partial z} = 0.$$

На продольной оси аппарата, при $r = 0$, ставились условия симметрии:

$$V_r = 0; \frac{\partial V_z}{\partial r} = 0; \frac{\partial V_\phi}{\partial r} = 0.$$

Созданная математическая модель полностью описывает гидродинамику газа, используемого для продувки в барабанной вращающейся печи.

Численный метод исследования

Построенная математическая модель течения несжимаемого вязкого газа в круглой вращающейся трубе не имеет аналитического решения, так как уравнения обладают существенной нелинейностью [6]. Математическая модель решается численным методом.

В качестве масштабов для получения безразмерной системы уравнений используются радиус печи R , средняя осевая скорость на входе V_0 , плотность ρ и вязкость газа ν на входе в аппарат. В получаемой системе уравнений появляются два безразмерных критерия подобия:

$$Re = \frac{V_0 R}{\nu}; Rws = \frac{V_{\phi R}}{V_0};$$

где Re – число Рейнольдса, Rws – безразмерная окружная скорость печи. Исходная система решается методом конечных разностей.

В настоящее время наиболее перспективным подходом среди численных методов исследования системы дифференциальных уравнений второго порядка в частных производных, описывающих гидродинамику пространственного течения, является метод решения уравнений в физических переменных «скорость–давление» [7]. Поэтому в работе решение задачи выполнялось в переменных «скорость–давление». Одним из эффективных способов решения уравнений движения несжимаемой среды в переменных «скорость–давление» является метод физического расщепления по времени полей скорости и давления [8]. Используя метод физического расщепления полей скорости и давления, получим два векторных соотношения

$$\frac{\mathbf{w}^+ - \mathbf{w}^n}{\Delta \tau} + (\mathbf{w}^n \cdot \nabla) \mathbf{w}^+ = -\nabla p^n + \nabla^2 \mathbf{w}^+;$$

$$\frac{\mathbf{w}^{n+1} - \mathbf{w}^+}{\Delta\tau} = -\nabla(\delta p),$$

где верхним индексом «+» обозначено промежуточное сеточное значение вектора скорости и введена поправка к давлению между временными слоями n и $n + 1$.

Умножая скалярно последнее соотношение на градиент и учитывая соленоидальность вектора скорости на $(n + 1)$ -м временном слое, получаем уравнение Пуассона для поправки давления [9]:

$$\nabla^2(\delta p) = \frac{\nabla \cdot \mathbf{w}}{\Delta\tau}.$$

При решении стационарной задачи все уравнения удобнее представить в виде нестационарных уравнений и стационарное решение системы уравнений искать эволюционным методом установления по времени. На всех границах расчетной области используется условие Неймана для поправки к давлению, при этом следует отметить, что градиент давления на границах области не равен нулю, а может быть определен из проекций уравнения переноса импульса на границу исследуемой области.

В силу нелинейности системы уравнений выбор временных шагов и количества необходимых итераций устанавливается опытным путем. Число временных шагов определяется выполнением неравенства для всех искомых функций

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \tau} \right)_{i,j,k} = \max \left| \frac{\Phi_{i,j,k}^{n+1} - \Phi_{i,j,k}^n}{\Delta\tau} \right| < \varepsilon.$$

Для решения систем дифференциальных уравнений типа уравнений переноса скалярной транспортабельной субстанции в работе использовалась неявная двухслойная схема переменных направлений, предложенная Дугласом и Ганом и записанная в «дельта»-форме [10].

Дифференциальное уравнение второго порядка в частных производных можно решить численно, записывая разностный аналог дифференциального уравнения [11], используя метод расщепления по координатам и применяя методику прогонки для решения получившейся системы линейных алгебраических уравнений [12]. Для получения устойчивого вычислительного алгоритма и достоверных результатов необходимо контролировать сеточное число Рейнольдса и условие диагонального преобладания прогоночных коэффициентов. Проверка на сеточную сходимость позволила выбрать оптимальное количество узлов разностной сетки в расчетной области, цилиндрическая система координат: $N_r = 40$, $N_z = 360$.

Результаты исследований

Верификацию созданной модели проводили сравнением расчетов по модели с аналитическим решением простой задачи. Течение в круглой трубе без вращения (рис. 2, 3). Хорошо известно, что установившееся течение представляет собой параболу Пуазейля с максимальным значением V_z на оси, равным 2.

Как видно на рис. 2, выполненный расчет хорошо совпадает с теоретической параболой. На рис. 3 показано, что при таком режиме течения профиль V_z выходит на установившуюся параболу примерно на расстоянии трех радиусов от ударного входа $V_0 = 1$.

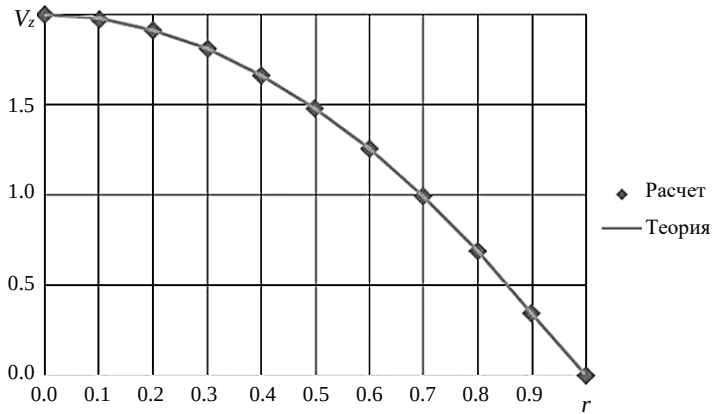


Рис. 2. Сравнение расчета с аналитическим решением профиля V_z на выходе из аппарата, $Re = 10$, $Rws = 0$

Fig. 2. Comparison of the calculated and analytical profiles of V_z at the apparatus outlet for $Re = 10$, $Rws = 0$

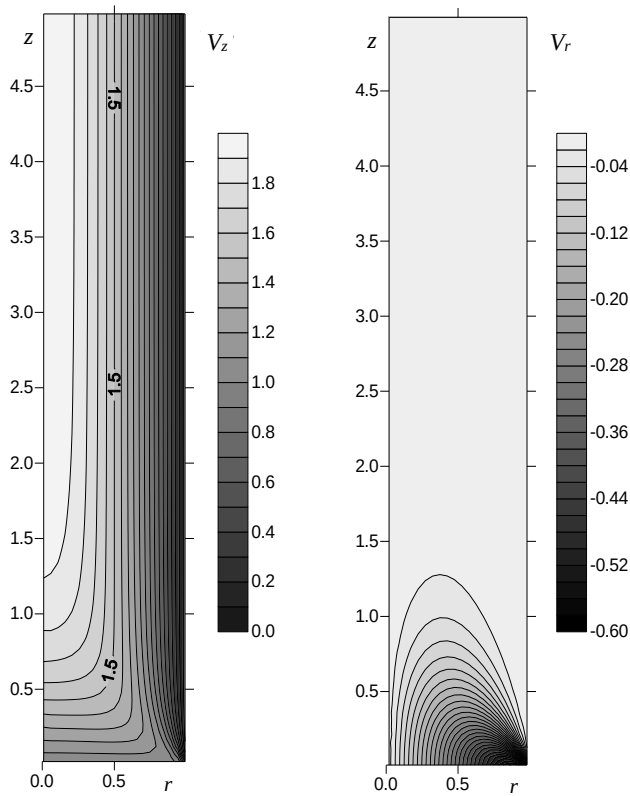


Рис. 3. Распределение компонент поля скорости в аппарате при параметрах течения $Re = 10$, $Rws = 0$

Fig. 3. Distribution of the velocity field components along the apparatus with flow parameters $Re = 10$, $Rws = 0$

На рис. 4 показано сравнение профиля аксиальной скорости, рассчитанной по представленной модели, с данными Лавана [13]. Анализ полученных данных позволяет говорить, что модель правильно учитывает влияние вращающейся трубы на профиль аксиальной скорости.

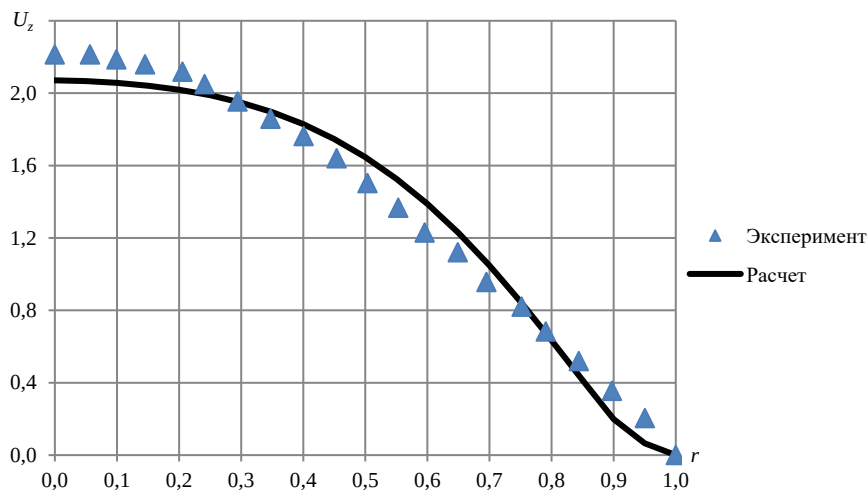


Рис. 4. Сравнение расчета с экспериментом [13] профиля U_z при $z = 4.3$, $Re = 20$, $Rws = 5.22$

Fig. 4. Comparison of the calculated and experimental [13] profiles of U_z at $z = 4.3$, $Re = 20$, $Rws = 5.22$

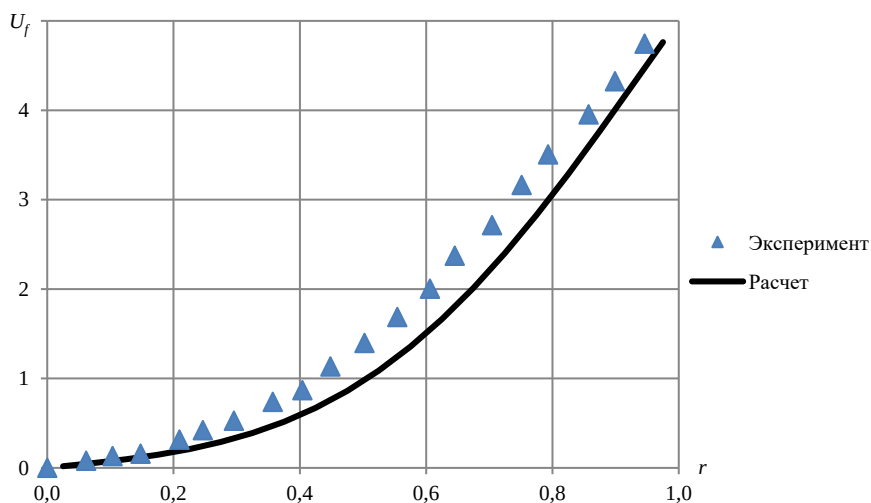


Рис. 5. Сравнение расчета с экспериментом [13] профиля U_f при $z = 0.95$, $Re = 20$, $Rws = 5.22$

Fig. 5. Comparison of the calculated and experimental [13] profiles of U_f at $z = 0.95$, $Re = 20$, $Rws = 5.22$

На рис. 5 приведено сравнение рассчитанного по модели профиля окружной скорости с экспериментальными данными [13]. Запоздывание развития профиля окружной скорости может быть связано с тем, что в расчетах на входе в трубу задается ударный профиль аксиальной скорости. Существует определенная зона формирования параболы, когда влияние стенки занижено.

На рис. 6 показано распределение рассчитанной аксиальной компоненты вектора скорости в рабочем объеме аппарата.

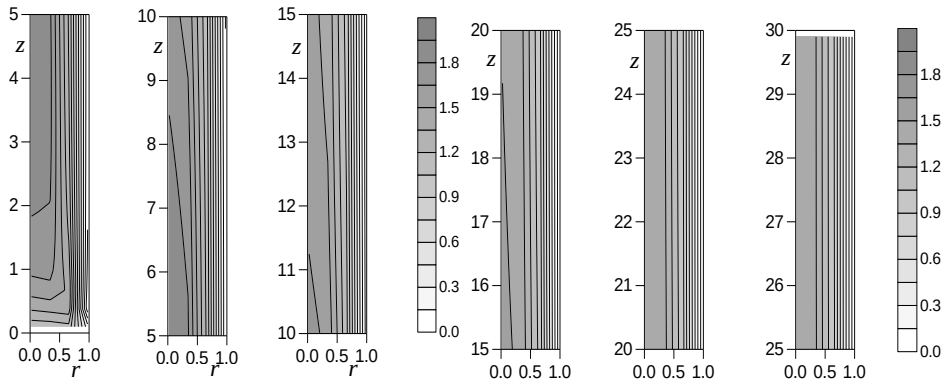


Рис. 6. Распределение аксиальной компоненты поля скорости в аппарате при параметрах течения $Re = 100$, $Rws = 5$

Fig. 6. Distribution of the axial velocity component along the apparatus with flow parameters $Re = 100$, $Rws = 5$

На рис. 7 показано распределение рассчитанной угловой компоненты вектора скорости в рабочем объеме аппарата.

На рис. 8 показано распределение рассчитанной радиальной компоненты вектора скорости в рабочем объеме аппарата.

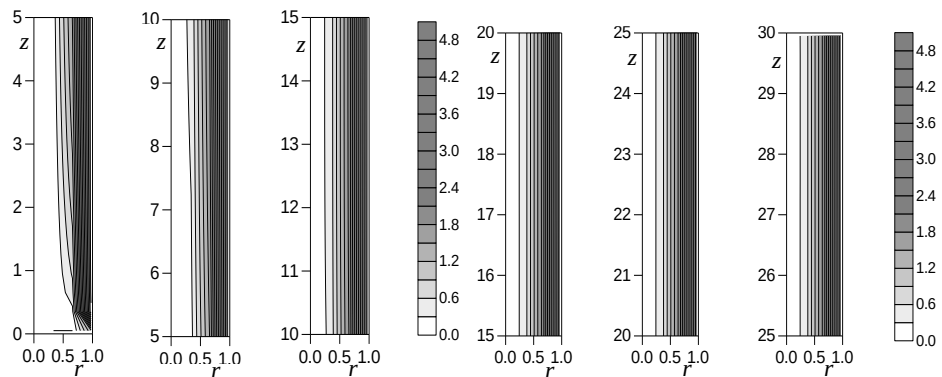


Рис. 7. Распределение угловой компоненты поля скорости в аппарате при параметрах течения $Re = 100$, $Rws = 5$

Fig. 7. Distribution of the angular velocity component along the apparatus with flow parameters $Re = 100$, $Rws = 5$

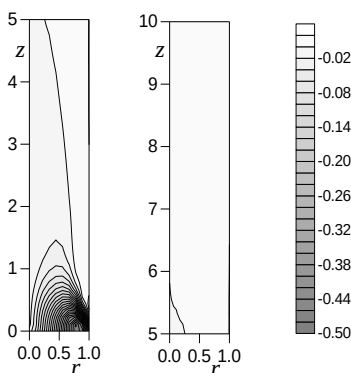


Рис. 8. Распределение радиальной компоненты поля скорости в аппарате при параметрах течения $Re = 100$, $Rws = 5$

Fig. 8. Distribution of the radial velocity component along the apparatus with flow parameters $Re = 100$, $Rws = 5$

Вращение печи оказывает значительное влияние на течение продувочного газа в рабочей зоне аппарата. Появляется существенная неоднородность в области возле входа в аппарат. Профиль окружной скорости V_ϕ формируется примерно на расстоянии десяти радиусов от входа. Аксиальная скорость V_z имеет на выходе из аппарата более пологий профиль, чем при течении без вращения стенки печи. Компоненты вектора скорости связаны в том числе через уравнение неразрывности потока. Входной профиль вектора скорости также оказывает влияние на гидродинамическую обстановку внутри печи.

Заключение

Рассмотрена математическая модель ламинарного, осесимметричного течения вязкой несжимаемой жидкости в аппарате цилиндрической формы. Вращение стенки печи оказывает существенное влияние на профиль скорости жидкости внутри аппарата. Особенно это заметно во входной области. Возле стенки формируются вихревые структуры с противотоком, здесь профиль аксиальной скорости имеет более вытянутую форму по сравнению с параболой Пуазейля; на оси симметрии значение больше. Развитие окружной скорости зависит от числа Рейнольдса и скорости вращения стенки. Радиальная скорость быстро вырождается, она заметна только во входной зоне.

Список источников

1. Пищулин В.П., Брендаков В.Н. Математическая модель процесса термического разложения в барабанной вращающейся печи // Известия Томского политехнического университета. 2005. № 308 (3). С. 106–109.
2. Брендаков В.Н., Дементьев Ю.Н., Кладиев С.Н., Пищулин В.П. Технология и оборудование производства оксидов урана // Известия Томского политехнического университета. 2005. № 308 (6). С. 95–98.
3. Пищулин В.П., Алимпиева Е.А., Зарипова Л.Ф., Кропочев Е.В. Разработка технологии получения оксидов урана ядерной чистоты // Известия вузов. Физика. 2017. № 60 (11/2). С. 86–91.

4. Zhiganov A., Lobas O., Pishchulin V., Mironov V. Thermal decomposition of $(\text{NH}_4)_2\text{U}_4\text{O}_{13}$ // Vth Korea – Russia Intern. Symp. on Science and Technology Proceeding (KORUS 2001). 2001. Tomsk : Tomsk Polytechnic University, 2001. V. 2. P. 165–167.
5. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа : учебник для вузов. 6-е изд., перераб. и доп. М. : Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит, 1987.
6. Петухов Б.С. Теплообмен и сопротивление при ламинарном течении жидкости в трубах. М. : Энергия, 1967.
7. Пейре Р., Тейлор Т.Д. Вычислительные методы в задачах механики жидкости. Л. : Гидрометеоиздат, 1986.
8. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М. : Энергоатомиздат, 1984.
9. Douglas J., Gunn J.E. A general formulation of alternating direction implicit methods. Part 1: Parabolic and hyperbolic problems // Numerische Math. 1964. V. 6. P. 428–453.
10. Роуч П. Вычислительная гидродинамика. М. : Мир, 1980.
11. Турубаев Р.Р., Шваб А.В. Численное исследование аэродинамики закрученного турбулентного течения и процесса классификации частиц в вихревой камере центробежного аппарата // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2020. № 65. С. 137–147. doi: 10.17223/19988621/65/11
12. Флетчер К. Вычислительные методы динамики жидкостей : в 2 т. М. : Мир, 1991.
13. Lavan Z., Nielsen H., Fejer A.A. Separation and Flow Reversal in Swirling Flows in Circular Ducts // Physics of fluids. 1969. V. 12 (9). P. 1747–1757.

References

1. Pishchulin V.P., Brendakov V.N. (2005) Matematicheskaya model' protsessa termicheskogo razlozheniya v barabannoy vrashchayushcheysya pechi [A mathematical model of thermal decomposition in a rotary drum furnace]. *Izvestiya Tomskogo politekhnicheskogo universiteta – Bulletin of the Tomsk Polytechnic University*. 308(3). pp. 106–109.
2. Brendakov V.N., Dement'ev Yu.N., Kladiev S.N., Pishchulin V.P. (2005) Tekhnologiya i oborudovanie proizvodstva oksidov urana [Technology and equipment for uranium oxide production]. *Izvestiya Tomskogo politekhnicheskogo universiteta – Bulletin of the Tomsk Polytechnic University*. 308(6). pp. 95–98.
3. Pishchulin V.P., Alimpieva E.A., Zaripova L.F., Kropochev E.V. (2017) Razrabotka tekhnologii polucheniya oksidov urana yadernoy chistoty [Development of technology for obtaining uranium oxides of nuclear purity]. *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy – Russian Physics Journal*. 60(11/2). pp. 86–91.
4. Zhiganov A., Lobas O., Pishchulin V., Mironov V. (2001) Thermal decomposition of $(\text{NH}_4)_2\text{U}_4\text{O}_{13}$. *Proceedings of the Vth Korea – Russia International Symposium on Science and Technology*. Tomsk Polytechnic University, Tomsk. 2. pp. 165–167.
5. Loytsyanskiy L.G. (1987) *Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid and gas mechanics]. Moscow: Nauka.
6. Petukhov B.S. (1967) *Teploobmen i soprotivlenie pri laminarnom techenii zhidkosti v trubakh* [Heat transfer and resistance in a laminar fluid flow in pipes]. Moscow: Energiya.
7. Peyret R., Taylor T.D. (1983) *Computational Methods for Fluid Flow*. Springer-Verlag.
8. Patankar S.V. (1980) *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*. New York: Hemisphere Publishing Corporation.
9. Douglas J., Gunn J.E. (1964) A general formulation of alternating direction implicit methods. Part 1: Parabolic and hyperbolic problems. *Numerische Mathematik*. 6. pp. 428–453. doi: 10.1007/BF01386093
10. Roache P.J. (1976) *Computational Fluid Dynamics*. Albuquerque: Hermosa Publishers.
11. Turubayev R.R., Shvab A.V. (2020) Chislennoe issledovanie aerodinamiki zakruchennogo turbulentnogo techeniya i protsessa klassifikatsii chastits v vikhreвой kamere tsentrobezh-

- nogo apparata [Numerical study of swirling turbulent flow aerodynamics and classification of particles in a vortex chamber of a centrifugal machine]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 65. pp. 137–147. doi: 10.17223/19988621/65/11
12. Fletcher C. (1991) *Computational Techniques for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag.
13. Lavan Z., Nielsen H., Fejer A.A. (1969) Separation and flow reversal in swirling flows in circular ducts. *Physics of Fluids*. 12(9). pp. 1747–1757. doi: 10.1063/1.1692738

Сведения об авторах:

Ким Валерия Валерьевна – аспирант физико-технического факультета Томского государственного университета (Томск, Россия); младший научный сотрудник Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения РАН (Томск, Россия). E-mail: kimvaleriia@mail.ru

Брендаков Владимир Николаевич – доктор физико-математических наук, профессор кафедры «Высшая математика и информационные технологии» Северского технологического института – филиала НИЯУ «МИФИ» (Северск, Россия). E-mail: vnbrendakov@mephi.ru

Information about the authors:

Kim Valeriya V. (Tomsk State University, Institute of Strength Physics and Materials Science of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences (ISPMS), Tomsk, Russian Federation). E-mail: kimvaleriia@mail.ru

Brendakov Vladimir N. (Doctor of Physics and Mathematics, Seversk Technological Institute – a branch of the National Research Nuclear University MEPHI, Seversk, Russian Federation). E-mail: vnbrendakov@mephi.ru

Статья поступила в редакцию 18.09.2023; принята к публикации 05.08.2024

The article was submitted 18.09.2023; accepted for publication 05.08.2024

Научная статья

УДК 533

doi: 10.17223/19988621/90/11

Исследование газодинамики горения смесового твёрдого топлива при колебаниях давления

Алексей Юрьевич Крайнов¹, Ксения Михайловна Моисеева²

^{1,2} Томский государственный университет, Томск, Россия

¹ akrainov@ftf.tsu.ru

² Moiseeva_KM@t-sk.ru

Аннотация. Представлены результаты численного исследования нестационарной скорости горения твёрдых ракетных топлив при гармоническом изменении давления над поверхностью горения. Получены зависимости амплитуды колебаний скорости горения от частоты колебаний давления. Зависимость амплитуды изменения скорости горения от частоты изменения давления немонотонная: с ростом частоты колебаний давления амплитуда колебаний скорости сначала увеличивается, а затем уменьшается.

Ключевые слова: твёрдое топливо, математическая модель, колебания давления, нестационарная скорость горения, амплитуда скорости горения

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 24-21-00071.

Для цитирования: Крайнов А.Ю., Моисеева К.М. Исследование газодинамики горения смесового твёрдого топлива при колебаниях давления // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2024. № 90. С. 130–139. doi: 10.17223/19988621/90/11

Original article

A study of the gas dynamics of combustion of a mixed solid propellant with pressure fluctuations

Aleksey Yu. Krainov¹, Kseniya M. Moiseeva²

^{1,2} Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation

¹ akrainov@ftf.tsu.ru

² Moiseeva_KM@t-sk.ru

Abstract. The non-stationary burning rate of a solid rocket propellant under harmonic variations in pressure over the combustion surface is studied. The physical and mathematical model is based on the equations of heat transfer and oxidizer decomposition in the solid phase, and on the flow model for the reacting products of solid propellant gasi-

fication. Calculations are carried out for the unsteady burning rate of mixed solid propellants with harmonic pressure variations over the combustion surface. The dependence of the amplitude of the burning rate fluctuations on the frequency of the pressure variations are obtained. The amplitude of the burning rate varies non-monotonically with frequency. As the frequency increases, the amplitude first increases and then decreases. At a frequency of pressure variation with a semi-period greater than or equal to the characteristic time of relaxation for heat transfer in solid propellants, the instantaneous burning rate at the lowest point of the pressure curve is lower than the equilibrium value and is higher at the highest point. At high frequencies, the burning rate exceeds the corresponding equilibrium value at minimum pressure and is lower than the equilibrium value at maximum pressure.

Keywords: solid propellant, mathematical model, pressure fluctuations, unsteady burning rate, burning rate amplitude

Acknowledgments: This study was financially supported by the Russian Science Foundation (project No. 24-21-00071).

For citation: Krainov, A.Yu., Moiseeva, K.M. (2024) A study of the gas dynamics of combustion of a mixed solid propellant with pressure fluctuations. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 90. pp. 130–139. doi: 10.17223/19988621/90/11

Введение

Одна из сложных и важных задач теории горения – определение динамики скорости горения твердого ракетного топлива при изменении давления в камере сгорания при больших скоростях изменения давления. Феноменологическая теория нестационарного горения [1, 2] не позволяет определить изменение скорости горения при больших скоростях изменения давления [3, 4]. В ракетных двигателях на твердом топливе могут возникать колебания давления. На это влияют разные факторы: размер камеры, свойства топлива и давление в ней [5, 6]. Для экспериментального изучения данного явления используют Т-камеру [7, 8]. Частота изменения давления в камере может варьировать от 100 до 1 000 и более колебаний в секунду. Причина таких колебаний – акустическая проводимость топлива [7].

Авторы [9] представили результаты измерения нестационарной скорости горения гомогенного и модельного смешанного твердых топлив при резком сбросе давления в полужамкнутом объеме. В зависимости от глубины и скорости сброса давления выделено пять характерных переходных режимов: квазистационарный, слабо квазистационарный, колебательный, режим «гашение – повторное воспламенение», полное погасание. В работе [10] представлены результаты исследования влияния дисперсности порошка алюминия в составе конденсированных систем на характеристики зажигания и нестационарного горения. Показано, что задержка времени зажигания и температура поверхности горения уменьшаются при уменьшении размера частиц, а замена нанодисперсных порошков на порошки микронных размеров вызывает рост акустической проводимости. Отмечено, что увеличение содержания порошка алюминия в составе топлива приводит к стабилизации процесса горения. В [11] предложено модельное уравнение для расчета нестационарной колебательной скорости горения твердого ракетного топлива. Результаты расчетов по модели полностью согласуются с результатами

расчетов по феноменологической теории нестационарного горения Б.В. Новожилова [1].

В [12] представлен разработанный подход теоретического исследования акустической неустойчивости рабочего процесса в РДТТ, основанный на решении системы уравнений газовой динамики продуктов сгорания топлива в камере сгорания. Течение в камере сгорания представляется в виде суперпозиции стационарного и пульсационного течений в предположении, что амплитуда колебаний в камере сгорания существенно меньше величин, характерных для стационарного течения [12]. Для определения пульсационных составляющих параметров состояния продуктов сгорания решаются уравнения для эволюции возмущения, искусственно вносимого в камеру сгорания. При таком подходе экспериментально измеренная величина акустической проводимости используется в граничном условии на поверхности горения для уравнений, описывающих эволюцию возмущения давления. Развиваются подходы, основанные на модели нестационарных течений в камере сгорания и модели нестационарного горения топлива, позволяющие корректно описать взаимодействие возмущений давления с зоной горения твердого топлива [13–16].

Цель данной работы – проанализировать нестационарное горение смесового твердого топлива при гармоническом изменении давления над поверхностью горения. Эта задача может быть решена с использованием сопряженной модели горения твердого топлива, которая учитывает процессы переноса тепла как в твердой, так и в газовой фазе [13–16].

Физико-математическая модель

Смесовое твердое топливо (СТТ) состоит из смеси порошка перхлората аммония (ПХА) и бутилкаучука (БК). Когда такое топливо горит, под поверхностью образуется прогретый слой, в котором происходит экзотермическая химическая реакция разложения ПХА. По мере того как глубина превращения ПХА достигает определенного уровня, начинают образовываться газообразные продукты его разложения, которые оттекают от поверхности твердого топлива. В то же время с поверхности твердого топлива происходит испарение горючей связки (БК). Над поверхностью топлива происходит диффузионно-конвективное перемешивание паров связки и полупродуктов разложения ПХА, которые вступают в химические реакции. Экзотермическая химическая реакция в газовой фазе повышает температуру газа. На некотором расстоянии от поверхности все химические реакции завершаются. Математическая модель горения смесового твердого топлива, учитывающая описанную физическую картину горения, была сформулирована в [16] при условии, что массовая концентрация частиц бора равна нулю.

В математической модели заложены следующие предположения: газообразные продукты термического разложения перхлората аммония начинают образовываться на завершающем этапе последовательности реакций его необратимого распада, когда глубина полупревращения ПХА достигает значения 0,99. Предполагается, что реакция распада ПХА имеет первый порядок, а скорость реакции зависит от температуры по закону Аррениуса. Для конденсированной фазы, при $x < 0$, были записаны уравнения теплопроводности и глубины полупревращения перхлората аммония.

В процессе горения давление над поверхностью горения изменяется в соответствии с заданным законом во времени. Теплофизические характеристики твердой фазы не зависят от температуры и определяются компонентным составом СТТ. При разогреве связка испаряется с поверхности топлива с известной величиной теплоты испарения. Учитывается расширение газа при его нагревании. Молекулярная масса газа остается постоянной. Параметры состояния газа подчиняются уравнению состояния идеального газа.

В физико-математической модели над поверхностью твердого топлива уравнения сохранения массы, импульса и энергии для сжимаемого газа с учетом теплопроводности, уравнения баланса массы окислителя в газе с учетом диффузии и уравнение состояния газа образуют систему уравнений. Поверхность смесового твердого топлива соответствует координате $x = 0$. На поверхности топлива ставятся граничные условия сопряжения, которые описывают сохранение потоков энергии и массы компонентов. На правой границе области предполагается истечение продуктов сгорания в объем с заданным давлением, которое может меняться во времени.

В условиях математической постановки задачи [16] при отсутствии порошка бора в составе твердого топлива в настоящей статье исследовано влияние колебаний давления газа над поверхностью топлива на изменение скорости горения СТТ. Скорость химической реакции в газовой фазе над поверхностью горючего вещества описывается законом Аррениуса, при этом порядок реакции обозначается как n_g :

$$W_{ch} = \rho_{ox}^{n_g} k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{R_u T_g}\right), \quad (1)$$

где ρ_{ox} – парциальная плотность окислителя, k_0 – предэкспоненциальный множитель, E_a – энергия активации, R_u – универсальная газовая постоянная, T_g – температура газа.

В работе [16] описан метод численного решения системы уравнений математической модели с использованием численного метода С.К. Годунова [17].

Результаты параметрических расчетов и обсуждение

Численное решение задачи выполнено при следующих значениях физических величин [16]: $Q = 4.26$ МДж/кг, $E_a = 189$ кДж/моль, $c_{pg} = 1466.5$ Дж/(кг·К), $c_{vg} = 1202$ Дж/(кг·К), $R_g = 264.5$ Дж/(кг·К), $\lambda_g = 0.5$ Вт/(м·К), $\eta = 2 \cdot 10^{-5}$ Па·с. Теплофизические и кинетические характеристики СТТ задавались равными $Q_c = 0.7$ МДж/кг, $k_c = 6.3 \cdot 10^8$ с⁻¹, $E_c = 100$ кДж/моль, $\lambda_c = 0.5$ Вт/(м·К). Доля окислителя в составе твердого топлива задавалась равной $\alpha_{ox} = 64\%$, доля связки – $\alpha_f = 0.36\%$. Плот-

ность твердого топлива определялась через его состав: $\rho_c = \frac{1}{\alpha_{ox}/\rho_{ox} + \alpha_f/\rho_f}$,

где $\rho_{ox} = 1950$ кг/м³, $\rho_f = 1270$ кг/м³. Порядок реакции в законе Аррениуса равен n_g . Давление газа над поверхностью горения задавалось равным 10.0 МПа. Теплофизические параметры СТТ с $n_g = 1$ задавались для модельного твердого топлива, которое горит при давлении 10 МПа со скоростью 13.4 мм/с. Для топлива, у которого порядок реакции в законе Аррениуса имеет величину $n_g = 1.5$, предполагалось,

что оно горит при давлении 10 МПа с такой же скоростью. В этом случае подбиралась величина предэкспоненциального множителя в законе Аррениуса, при которой скорость горения топлива при 10 МПа также имеет величину 13.4 мм/с. Известно, что скорость горения твердых топлив от давления пропорциональна p^ν , где величина $\nu = n_g/2$ [16]. При $n_g = 1$ ($\nu = 0.5$) величина предэкспоненциально-го множителя задавалась равной $k_{05} = 9.8 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1}$, при $n_g = 1.5$ ($\nu = 0.75$) величина предэкспоненциального множителя задавалась равной $k_{05} = 5.8 \cdot 10^9 (\text{с}^{-1} \cdot \text{кг}^{-0.5} \cdot \text{м}^{1.5})$.

На рис. 1–6 представлены результаты численного исследования задачи. На рис. 1 показана структура волны горения топлива при постоянном давлении над поверхностью. Рисунок 1, а построен для $n_g = 1$, рис. 1, б – для $n_g = 1.5$.

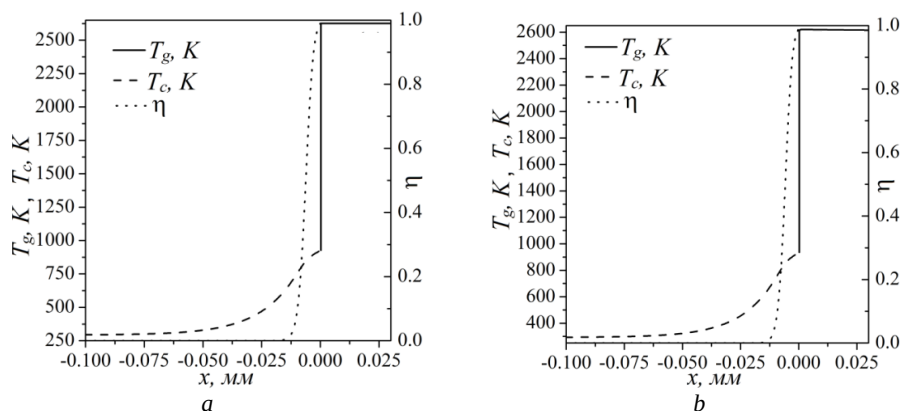


Рис. 1. Структура волны горения в стационарном режиме: а – $n_g = 1$, б – $n_g = 1.5$.
Давление над поверхностью твердого топлива – 10 МПа

Fig. 1. Structure of a combustion wave in a steady state: n_g (a) 1 and (b) 1.5.
The pressure over the solid propellant surface is 10 МПа

На рис. 2–3 представлены зависимости скорости горения твердого топлива от времени, построенные при разной частоте колебаний давления над поверхностью топлива при двух значениях n_g .

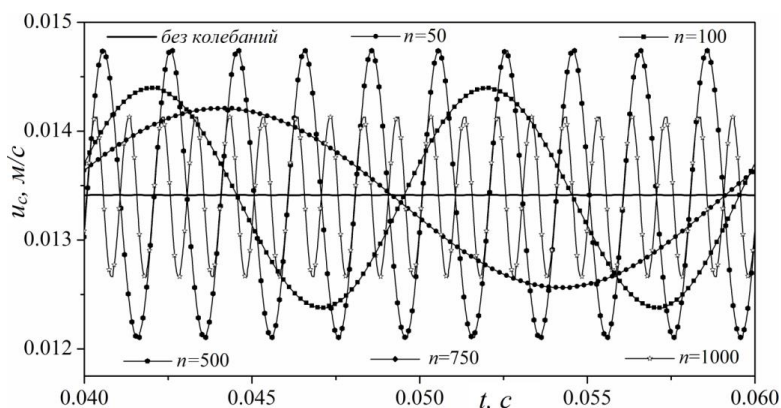


Рис. 2. Зависимость скорости горения твердого топлива от времени при $n_g = 1$
Fig. 2. Time dependence of the burning rate of the solid propellant for $n_g = 1$

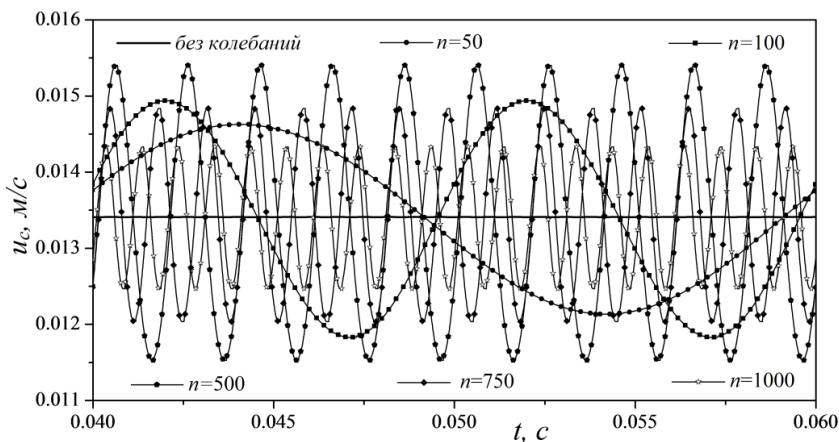


Рис. 3. Зависимость скорости горения твердого топлива от времени при $n_g = 1.5$
Fig. 3. Time dependence of the burning rate of the solid propellant for $n_g = 1.5$

Согласно рис. 2, 3 для порядка реакции в газовой фазе $n_g = 1.5$ амплитуда изменения скорости горения смешанного твердого топлива из-за изменения давления выше, чем при $n_g = 1$. На рис. 2, 3 скорости горения построены при различных величинах частоты колебаний давления над поверхностью топлива. Получено, что максимальная амплитуда скорости горения соответствует частоте колебаний 500 при двух значениях порядка реакции в газовой фазе.

На рис. 4, 5 представлены зависимости скорости горения смешанного твердого топлива от времени совместно с зависимостями давления газа над поверхностью твердого топлива от времени при двух величинах порядка реакции в газовой фазе. Согласно рис. 4, 5 имеет место смещение максимума скорости горения смешанного твердого топлива от максимума давления газа над поверхностью топлива.

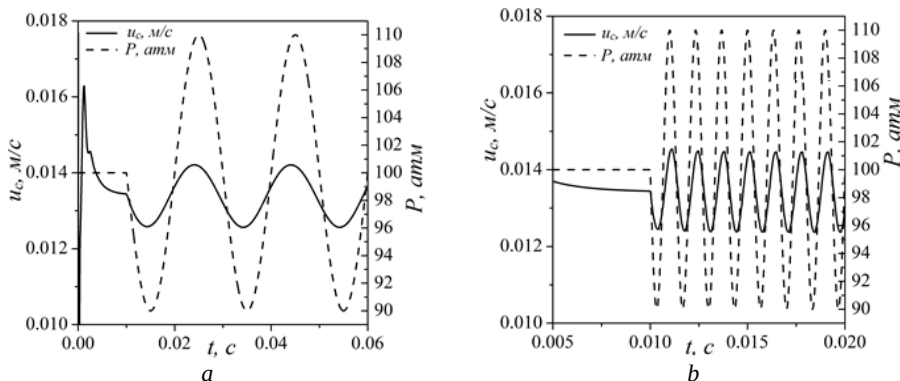


Рис. 4. Зависимость скорости горения смешанного твердого топлива (сплошная линия) и давления газа над поверхностью топлива (пунктир) от времени при $n_g = 1$.
 Частота колебаний равна 50 (a), 750 (b)

Fig. 4. Time dependences of the burning rate of the mixed solid propellant (solid line) and gas pressure over the propellant surface (dashed line) for $n_g = 1$. The oscillation frequency is (a) 50 and (b) 750

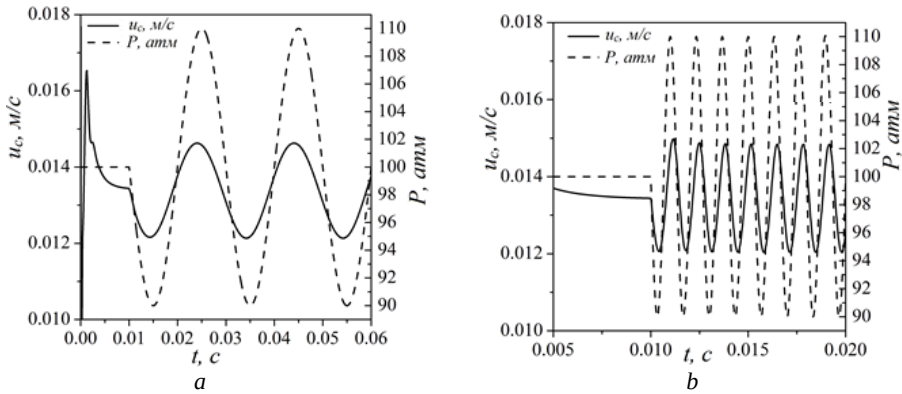


Рис. 5. Зависимость скорости горения смешанного твердого топлива (сплошная линия) и давления газа над поверхностью топлива (пунктир) от времени при $n_g = 1.5$.
Частота колебаний равна 50 (а), 750 (б)

Fig. 5. Time dependences of the burning rate of the mixed solid propellant (solid line) and gas pressure over the propellant surface (dashed line) for $n_g = 1.5$. The oscillation frequency is (a) 50 and (b) 750

Из сравнения рис. 4, 5 видна разница в амплитудах колебаний скорости горения смешанного твердого топлива в зависимости от частоты колебаний давления и показателя в законе горения газа.

Из серии расчетов была определена зависимость максимальной и минимальной мгновенной скорости горения смешанного твердого топлива от частоты колебаний давления над поверхностью топлива. Результаты представлены на рис. 6.

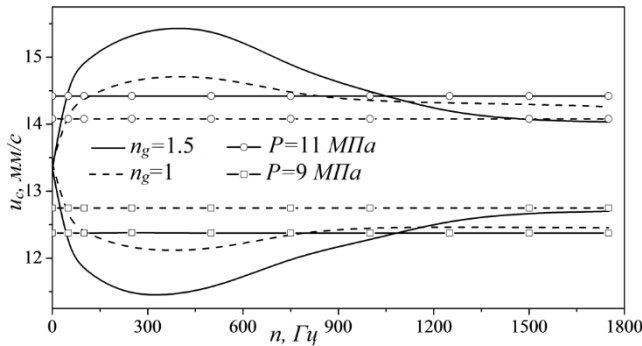


Рис. 6. Зависимость максимальной и минимальной скорости горения смешанного твердого топлива при колебаниях давления над поверхностью твердого топлива

Fig. 6. Maximum and minimum burning rate of the mixed solid propellant as a function of pressure fluctuations over the solid propellant surface

На рис. 6 верхние ветви кривых соответствуют максимальным, нижние – минимальным мгновенным значениям скорости горения твердого топлива при соответствующих частотах колебаний давления газа над поверхностью топлива. Сплошные линии соответствуют показателю степени в законе горения газа $n_g = 1.5$, пунктирные – показателю степени $n_g = 1.0$. Прямыми линиями с символами показаны значения скорости горения смешанных составов при давлении 9 МПа (линии

с квадратными фигурами) и 11 МПа (линии с круглыми фигурами). Из сопоставления кривых на рис. 6 видно, что экстремумы функций, описывающих зависимость мгновенных максимальной и минимальной скорости горения смесового твердого топлива при колебаниях давления над поверхностью твердого топлива, реализуются при одних и тех же величинах частоты колебаний давления над поверхностью топлива. При этом при увеличении частоты колебаний значения экстремумов скорости горения твердого топлива становятся близкими для двух выбранных порядков реакции в газе над поверхностью топлива. С увеличением частоты колебаний значения мгновенных значений максимальной и минимальной скорости горения твердого топлива стремятся к установившимся и не зависят от частоты колебаний давления для выбранного диапазона частот. Из сравнения линий, полученных для переменного давления, и линий, соответствующих постоянному давлению 9 и 11 МПа, видно, что для закона горения газа с показателем $n_g = 1.5$ мгновенные максимальные и минимальные значения скорости горения при высоких частотах колебаний реализуются выше и ниже соответствующих стационарных значений скорости горения твердого топлива при постоянных давлениях 9 и 11 МПа соответственно. Для закона горения газа $n_g = 1.0$ наблюдается противоположный эффект.

Заключение

На базе созданной физико-математической модели нестационарного горения твердых ракетных топлив были проведены вычисления нестационарной скорости горения при гармоническом изменении давления. Получены зависимости амплитуды колебаний скорости горения от частоты колебаний давления. Выявлено, что зависимость амплитуды скорости горения от частоты колебания давления является немонотонной: с ростом частоты колебаний давления амплитуда колебаний скорости сначала увеличивается, а затем уменьшается.

Список источников

1. Новожиллов Б.В. Нестационарное горение твердых ракетных топлив. М. : Наука, 1973. 176 с.
2. Зельдович Я.Б., Лейтунский О.И., Либрович В.Б. Теория нестационарного горения пороха. М. : Наука, 1975.
3. Новожиллов Б.В., Маршаков В.Н. Переходные режимы горения баллистического пороха в полузамкнутом объеме // Химическая физика. 2011. Т. 30, № 1. С. 25–37.
4. Новожиллов Б.В., Маршаков В.Н. Обратная задача теории нестационарного горения пороха // Химическая физика. 2011. Т. 30, № 12. С. 26–31.
5. Исследование ракетных двигателей на твердом топливе / под ред. М. Саммерфильда. М. : Изд-во иностр. лит., 1963.
6. Price E.W. Experimental Observations of Combustion Instability // Fundamentals of Solid-Propellant Combustion. New York : American Institute of Aeronautics and Astronautics, Inc., 1984. 733–790.
7. Архипов В.А., Волков С.А., Ревягин Л.Н. Экспериментальное исследование акустической проводимости горящей поверхности смесовых твердых топлив // Физика горения и взрыва. 2011. Т. 47, № 2. С. 74–80.
8. Coates R.L., Horton M.D., Ryan N.W. T-burner method of determining the acoustic admittance of burning propellants // AIAA Journal. 1964. Vol. 2 (6). P. 1119–1122.

9. Архипов В.А., Бондарчук С.С., Коротких А.Г. Сравнительный анализ методов измерения нестационарной скорости горения. II. Результаты исследования // Физика горения и взрыва. 2010. Т. 46, № 5. С. 88–96.
10. Архипов В.А., Бондарчук С.С., Коротких А.Г., Кузнецов В.Т., Громов А.А., Волков С.А., Ревягин Л.Н. Влияние дисперсности алюминия на характеристики зажигания и нестационарного горения гетерогенных конденсированных систем // Физика горения и взрыва. 2012. Т. 48, № 5. С. 148–159.
11. Рашковский С.А., Милёхин Ю.М., Ключников А.Н., Федорычев А.В. Метод модельного уравнения в теории нестационарного горения твердого ракетного топлива // Физика горения и взрыва. 2012. Т. 48, № 1. С. 71–79.
12. Куроедов А.А., Семенов П.А. Исследование акустической неустойчивости рабочего процесса в РДТТ с использованием импульсной Т-камеры // Физика горения и взрыва. 2021. Т. 57, № 4. С. 57–68.
13. Крайнов А.Ю., Порязов В.А. Численное моделирование погасания пороха Н при резком сбросе давления на основе сопряженной модели горения // Физика горения и взрыва. 2015. Т. 51, № 6. С. 47–52.
14. 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.
15. Krainov A.Yu., Poryazov V.A., Krainov D.A. Unsteady Combustion Modeling of Metallized Composite Solid Propellant // International Review on Modelling and Simulations. 2018. Vol. 11 (5). P. 297–305.
16. Порязов В.А., Моисеева К.М., Крайнов А.Ю. Исследование горения смесового твердого топлива с добавкой порошка бора // Физика горения и взрыва. 2022. Т. 58, № 5. С. 106–114.
17. Годунов С.К., Забродин А.В., Иванов М.Я., Крайко А.Н., Прокопов Г.П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. М. : Наука, 1976.

References

1. Novozhilov B.V. (1973) *Nestatsionarnoe gorenje tverdykh raketnykh topliv* [Unsteady burning of solid propellants]. Moscow: Nauka.
2. Zel'dovich Ya.B., Leypunskiy O.I., Librovich V.B. (1975) *Teoriya nestatsionarnogo goreniya porokha* [Theory of unsteady propellant burning]. Moscow: Nauka.
3. Marshakov V.N., Novozhilov B.V. (2011) Transient modes of double-base propellant combustion in a semiclosed volume. *Russian Journal of Physical Chemistry B*. 5(1). pp. 45–56. doi: 10.1134/S1990793111010088
4. Novozhilov B.V., Marshakov V.N. (2011) The inverse problem of the theory of nonstationary powder combustion. *Russian Journal of Physical Chemistry B*. 5(6). pp. 991–996. doi: 10.1134/S199079311106025X
5. Summerfield M. (1960) *Solid Propellant Rocket Research*. New York – London: Academic Press.
6. Price E.W. (1984) Experimental observations of combustion instability. *Fundamentals of Solid-Propellant Combustion*. pp. 733–790. doi: 10.2514/5.9781600865671.0733.0790
7. Arkhipov V.A., Volkov S.A., Revyagin L.N. (2011) Experimental study of the acoustic admittance of the burning surface of composite solid propellants. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 47(2). pp. 193–199. doi: 10.1134/S0010508211020080
8. Coates R.L., Horton M.D., Ryan N.W. (1964) T-burner method of determining the acoustic admittance of burning propellants. *AIAA Journal*. 2(6). pp. 1119–1122. doi: 10.2514/3.2477
9. Arkhipov V.A., Bondarchuk S.S., Korotkikh A.G. (2010) Comparative analysis of methods for measuring the transient burning rate. II. Research results. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 46(5). pp. 570–577. doi: 10.1007/s10573-010-0075-8
10. Arkhipov V.A., Bondarchuk S.S., Kuznetsov V.T., Korotkikh A.G., 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
11. Rashkovskii S.A., Milekhin Yu.M., Klyuchnikov A.N., Fedorychev A.V. (2012) Method of the model equation in the theory of unsteady combustion of a solid propellant. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 48(1). pp. 64–72. doi: 10.1134/S0010508212010091
 12. Kuroedov A.A., Semenov P.A. (2021) Investigation of acoustic instability in solid-propellant rocket motors with the use of a pulsed T-burner. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 57(4). pp. 433443. doi: 10.1134/S0010508221040067
 13. Krainov A.Y., Poryazov V.A. (2015) Numerical simulation of the extinction of n powder by a pressure drop based on a coupled combustion model. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 51(6). pp. 664–669. doi: 10.1134/S0010508215060076
 14. Poryazov V.A., Krainov A.Yu. (2017) Matematicheskaya model' i raschet nestatsionarnoy skorosti goreniya metallizirovannykh tverdykh raketykh 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. 99–110. doi: 10.17223/19988621/50/9
 15. Krainov A.Yu., Poryazov V.A., Krainov D.A. (2018) Unsteady combustion modeling of metallized composite solid propellant. *International Review on Modelling and Simulations*. 11(5). pp. 297–305. doi: 10.15866/iremos.v11i5.15020
 16. Poryazov V.A., Moiseeva K.M., Krainov A.Yu. (2022) Combustion of a composite solid propellant with addition of boron powder. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 58(5). pp. 602–609. doi: 10.1134/S0010508222050136
 17. Godunov S.K., Zabrodin A.V., Ivanov, M.I., Krayko A.N., Prokopov G.P. (1976) *Chislennoe reshenie mnogomernykh zadach gazovoy dinamiki* [Numerical solution of multidimensional problems of gas dynamics]. Moscow: Nauka.

Сведения об авторах:

Крайнов Алексей Юрьевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой математической физики физико-технического факультета Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: akrainov@ftf.tsu.ru

Моисеева Ксения Михайловна – доктор физико-математических наук, доцент, доцент кафедры математической физики физико-технического факультета Томского государственного университета (Томск, Россия). E-mail: Moiseeva_KM@t-sk.ru

Information about the authors:

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

Moiseeva Kseniya M. (Doctor of Physics and Mathematics, Tomsk State University, Tomsk, Russian Federation). E-mail: Moiseeva_KM@t-sk.ru

Статья поступила в редакцию 20.04.2024; принята к публикации 05.08.2024

The article was submitted 20.04.2024; accepted for publication 05.08.2024

Научная статья

УДК 532.5, 517.95

doi: 10.17223/19988621/90/12

Разрешимость одномерной задачи движения жидкости в пороупругой среде с проницаемыми границами

Александр Алексеевич Папин¹, Маргарита Андреевна Токарева²

^{1,2} Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия

¹ papin@math.asu.ru

² tma25@mail.ru

Аннотация. А.А. Папиным и М.А. Токаревой ранее была установлена разрешимость начально-краевой задачи фильтрации жидкости в вязкой пористой среде для случая непроницаемых границ. В настоящей статье исследуется задача об изотермическом движении несжимаемой жидкости в деформируемой пористой среде с проницаемыми границами. Доказано существование единственного локального классического решения задачи. Также установлен физический принцип максимума для функции пористости.

Ключевые слова: закон Дарси, фильтрация, пороупругость, локальная разрешимость, пористость

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке проекта «Современные модели гидродинамики для задач природопользования, промышленных систем и полярной механики» (2024–2026), гос. задание FZMW-2024-0003.

Для цитирования: Папин А.А., Токарева М.А. Разрешимость одномерной задачи движения жидкости в пороупругой среде с проницаемыми границами // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2024. № 90. С. 140–151. doi: 10.17223/19988621/90/12

Original article

Solvability of a one-dimensional problem of fluid flow in poroelastic medium with permeable boundaries

Aleksandr A. Papin¹, Margarita A. Tokareva²

^{1,2} Altai State University, Barnaul, Russian Federation

¹ papin@math.asu.ru

² tma25@mail.ru

Abstract. The initial-boundary value problem of a one-dimensional viscous fluid flow in a deformable viscous porous medium with permeable boundaries is considered. The governing equations are the equations of mass conservation for each phase, the equation

of momentum conservation for a liquid phase in terms of Darcy's law, the equation of momentum conservation for the whole system, and the rheological equation for porosity. The original system of equations in the Lagrange variables is reduced to a third-order equation for the porosity function. The first part of this paper presents the formulation of the problem, the definition of the classical solution to the considered problem, and the existence and uniqueness theorem for the problem of Hölder classes. In the second part of this paper, the local theorem of existence and uniqueness for the problem of Hölder classes is proved for an incompressible fluid using the Tikhonov-Schauder fixed-point theorem. The physical principle of the maximum porosity function is determined.

Keywords: Darcy's law, filtration, poroelasticity, local solvability, porosity

Acknowledgments: This work was supported with the financial support of the project "Modern models of hydrodynamics for environmental management, industrial systems and polar mechanics"(2024-26) (FZMW-2024-0003).

For citation: Papin, A.A., Tokareva, M.A. (2024) Solvability of a one-dimensional problem of fluid flow in poroelastic medium with permeable boundaries. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 90. pp. 140–151. doi: 10.17223/19988621/90/12

Введение

В последнее время задачи фильтрации жидкостей в деформируемых пористых средах стали очень актуальными. Проверенные опытом и практикой модели фильтрации – классические модели типа Маскета–Леверетта (Баклея–Леверетта в случае отсутствия капиллярного скачка), которые опираются на законы сохранения, эту тематику не охватывают, поскольку не учитывают сжимаемость пористых сред [1]. Если предположить, что скорость твердой среды (пористого скелета) непостоянна, то пороупругость необходимо учитывать. Возникает серия работ, в которых эта тематика начала исследоваться. Проблема в том, что очень малое количество работ посвящено обоснованию данных моделей. Модели, которые будут применяться в промышленности, требуют обоснования и проверки разностных схем. Цель данной работы – обоснование модели с условием протекания, которое имеет более прикладной характер.

Задачи фильтрации жидкостей в пороупругих средах возникают во множестве прикладных отраслей, таких как нефтегазодобыча, динамика снежно-ледового покрова, захоронение углекислого газа, а также находят применение в биологии и медицине (движение физиологических жидкостей в тканях, проблемы роста клеточной ткани и т.д.).

Течение одной фазы (жидкости), вызванное уплотнением, через другую фазу (твердую фазу) получило большое внимание в геологических науках [2]. В области динамики магмы большая часть предыдущих работ была посвящена течению через вязкую пористую матрицу, однако некоторые работы указывают на важность вязкоупругой матрицы в распространении магматических трещин.

Осадочные бассейны являются основными местами добычи жидких углеводородов и поэтому играют важную роль в нефтяной промышленности. Одна из проблем, влияющих на буровые операции, – случайное возникновение аномально высокого давления поровой жидкости, которое, если оно возникнет внезапно, может вызвать обрушение буровой скважины и, как следствие, выход ее из строя.

Таким образом, понимание того, как возникает такое высокое поровое давление, имеет как промышленный, так и научный интерес. Более того, изменение пористости с глубиной является источником информации для геологов, которые заинтересованы в понимании истории захоронения и опускания осадочных бассейнов. Поэтому модели уплотнения, описывающие эти процессы, представляют практический интерес [3]. Базовая модель уплотнения во многом аналогична процессу уплотнения почвы.

В данных процессах реологическое поведение пористой среды существенно усложняет рассматриваемые задачи. За последнее десятилетие было выполнено множество численных и экспериментальных исследований пороупругих сред [4, 5], однако обоснованию моделей уделялось недостаточное внимание. Частным примером является задача однофазной фильтрации в деформируемой вязкой пористой среде. Ранее авторами изучалась одномерная постановка с непроницаемыми границами, для которой была установлена глобальная разрешимость начально-краевой задачи в гельдеровских классах [6]. В данной статье доказана локальная теорема для случая проницаемых границ.

Математическая постановка задачи

В настоящей исследовательской работе анализируется задача о движении жидкости в деформируемой пористой среде. Для создания математической модели этой проблемы используются концепции и методы механики многофазных сред. Основные компоненты такой модели – уравнения сохранения массы для как жидкой, так и для твердой фазы, а также уравнение сохранения импульса, которое формулируется согласно закону Дарси, предполагая несжимаемость жидкости. Для учета реологических свойств пористой структуры используется реологическое соотношение типа Максвелла. Кроме того, в рамках исследования рассматривается уравнение баланса сил. Работы [7–10] выступают ключевыми источниками исследования, в них можно найти подробные сведения по этим аспектам. Данная работа направлена на более глубокое понимание механизмов движения жидкости в пористой среде и их математическое моделирование с использованием современных методов математики и механики.

Таким образом, рассматривается следующая система уравнений:

$$\frac{\partial(1-\phi)\rho_s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}((1-\phi)\rho_s v_s) = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial(\rho_f \phi)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_f \phi v_f) = 0,$$

$$q_D = -k(\phi) \left(\frac{\partial p_f}{\partial x} + \rho_f g \right), \quad (2)$$

$$\frac{\partial v_s}{\partial x} = -\frac{1}{\xi(\phi)} p_e, \quad p_e = p_{tot} - p_f, \quad (3)$$

$$\frac{\partial p_{tot}}{\partial x} = -\rho_{tot} g, \quad p_{tot} = \phi p_f + (1-\phi) p_s, \quad (4)$$

$$\rho_{tot} = \phi \rho_f + (1-\phi) \rho_s,$$

которая решается в области $(x, t) \in Q_T = \Omega \times (0, T)$, $\Omega = (0, 1)$, а также дополняется следующими краевыми и начальными условиями:

$$\begin{aligned} v_s|_{x=0, x=1} = 0 \quad q_D|_{x=0} = q_D^0(t), \quad q_D|_{x=1} = q_D^1(t), \\ p_{tot}|_{x=0} = p^0(t), \quad \phi|_{t=0} = \phi^0(x). \end{aligned} \quad (5)$$

Здесь ϕ – пористость, ρ_f, ρ_s, v_f, v_s – истинные плотности и скорости жидкой и твердой фаз соответственно, ρ_{tot} – плотность двухфазной среды, $q_D = \phi(v_f - v_s)$ – скорость Дарси, p_f, p_s – соответственно давления жидкой и твердой фаз, p_{tot} – общее давление, p_e – эффективное давление, g – плотность массовых сил, $\xi(\phi)$ – коэффициент объемной вязкости, $k(\phi)$ – коэффициент фильтрации (заданные функции), x, t – координаты Эйлера. Истинная плотность твердых частиц ρ_s принимается постоянной. Таким образом, решение поставленной задачи сводится к отысканию пористости, скоростей и давлений фаз, удовлетворяющих системе уравнений (1)–(4) и начально-краевым условиям (5).

В настоящей статье установлена разрешимость задачи (1)–(5) в малом по времени, а также доказана единственность.

Основные обозначения, которые будут использованы далее, будем понимать в общепринятом смысле [11]. Для функции $f(x, t)$, определенной в цилиндре $Q_T = \Omega \times (0, T]$ введем некоторые функциональные пространства. Пусть $\|\cdot\|_{q, \Omega}$ – норма в пространстве Лебега $L_q(\Omega)$, $q \in [1, \infty]$, которую будем также обозначать для краткости $\|\cdot\|_q = \|\cdot\|_{q, \Omega}$, $\|\cdot\| = \|\cdot\|_{2, \Omega}$. Нами также будет использоваться пространство Гельдера $C^\alpha(\Omega)$, $C^{k+\alpha}(\Omega)$, k – натуральное, $\alpha \in (0, 1]$, в котором определены нормы

$$\|f\|_{C^\alpha(\Omega)} \equiv \|f\|_{\alpha, \Omega} = \|f\|_{0, \Omega} + H_x^\alpha(f), \quad \|f\|_{0, \Omega} = \max_{x \in \Omega} |f(x)|,$$

$$H_x^\alpha(f) = \sup_{x_1, x_2 \in \Omega} |f(x_1) - f(x_2)| |x_1 - x_2|^{-\alpha},$$

$$\|f\|_{C^{k+\alpha}(\Omega)} \equiv \|f\|_{k+\alpha, \Omega} = \sum_{m=0}^k \|D_x^m f\|_{0, \Omega} + H_x^\alpha(D_x^k f).$$

Для функций, определенных на Q_T , нам потребуется пространство $C^{k+\alpha, m+\beta}(Q_T)$, где k, m – натуральные, $(\alpha, \beta) \in (0, 1]$, с нормой

$$\begin{aligned} \|f\|_{C^{k+\alpha, m+\beta}(Q_T)} \equiv \|f\|_{k+\alpha, m+\beta, Q_T} = \sum_{l=0}^k \|D_x^l f\|_{0, Q_T} + \\ + \sum_{j=1}^m \|D_t^j f\|_{0, Q_T} + H_x^\alpha(D_x^k f) + H_t^\beta(D_x^k f) + H_x^\alpha(D_t^m f) + H_t^\beta(D_t^m f), \end{aligned}$$

$$\text{где} \quad H_x^\alpha(f(x, t)) = \sup_{x_1, x_2 \in \Omega, t \in (0, T)} |f(x_1, t) - f(x_2, t)| |x_1 - x_2|^{-\alpha},$$

$$H_t^\beta(f(x, t)) = \sup_{t_1, t_2 \in (0, T), x \in \Omega} |f(x, t_1) - f(x, t_2)| |t_1 - t_2|^{-\beta}.$$

В случае $k = m$ и $\alpha = \beta$ используется обозначение $C^{k+\alpha}(Q_T)$.

Определение. Решением задачи (1)–(5) называется совокупность функций $\phi, v_s, v_f \in C^{2+\alpha, 1+\beta}(Q_T)$, $p_f, p_s \in C^{1+\alpha, 1+\beta}(Q_T)$, удовлетворяющих уравнениям (1)–(4) и принимающих начальные и граничные условия (5) как непрерывные в Q_T функции, а также таких, что $0 < \phi < 1$.

Теорема. Пусть данные задачи (1)–(5) обладают следующим свойством:

1. Функции $k(\phi)$, $\xi(\phi)$ и их производные до второго порядка непрерывны для $\phi \in (0, 1)$ и удовлетворяют условиям

$$k_0^{-1} \phi^{q_1} (1-\phi)^{q_2} \leq k(\phi) \leq k_0 \phi^{q_3} (1-\phi)^{q_4},$$

$$\frac{1}{\xi(\phi)} = a_0(\phi) \phi^{\alpha_1} (1-\phi)^{\alpha_2-1}, \quad 0 < R_1 \leq a_0(\phi) \leq R_2 < \infty,$$

где $k_0, \alpha_i, R_i, i = 1, 2$ – положительные постоянные, $q_1, \dots, q_4$ – фиксированные вещественные числа.

2. Функция g , начальная функция ϕ^0 и граничные функции $p^0(t)$, $q_D^0(t)$, $q_D^1(t)$ удовлетворяют условиям гладкости

$$g(x, t) \in C^{1+\alpha, 1+\beta}(\bar{Q}_T), \quad \phi^0(x) \in C^{2+\alpha}(\bar{\Omega}_T),$$

$$(q_D^0(t), q_D^1(t), p^0(t)) \in C^{1+\beta}(0, T)$$

и неравенствам

$$0 < m_0 \leq \phi^0(x) \leq M_0 < 1, \quad |g(x, t)| \leq g_0 < \infty, \quad x \in \bar{\Omega},$$

где m_0, M_0, g_0 – известные положительные константы.

Тогда существует единственное локальное классическое решение задачи (1)–(5), т.е. существует значение t_0 такое, что

$$(\phi(x, t), v_s(x, t), v_f(x, t)) \in C^{2+\alpha, 1+\beta}(Q_{t_0}),$$

$$(p_f(x, t), p_s(x, t)) \in C^{1+\alpha, 1+\beta}(Q_{t_0}),$$

а также $0 < \phi(x, t) < 1$ в $\bar{Q}_{t_0}$.

Локальная разрешимость задачи

Легко видеть, что переход к переменным Лагранжа при доказательстве теоремы позволяет исключить из системы скорости фаз, а также при постоянстве плотностей фаз свести исходную систему к одному уравнению для функции пористости [6]. Таким образом, после перехода к безразмерным переменным Лагранжа (по скорости твердой фазы) система (1)–(4) примет следующий вид:

$$\frac{\partial(1-\phi)}{\partial t} + (1-\phi)^2 \frac{\partial v_s}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi}{1-\phi} \right) + \frac{\partial}{\partial x} (\phi(v_f - v_s)) = 0, \tag{6}$$

$$q_D = -k(\phi) \left((1-\phi) \frac{\partial p_f}{\partial x} + \rho_f g \right), \quad (7)$$

$$(1-\phi) \frac{\partial p_{tot}}{\partial x} = -\rho_{tot} g, \quad (8)$$

$$(1-\phi) \frac{\partial v_s}{\partial x} = -a_1(\phi) p_e, \quad a_1(\phi) = \frac{1}{\xi(\phi)}. \quad (9)$$

Опишем схему преобразования системы (6)–(9). Подставляя во второе уравнение (6) скорость Дарси (7), получим

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi}{1-\phi} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(k(\phi) \left((1-\phi) \frac{\partial p_f}{\partial x} + \rho_f g \right) \right) = 0. \quad (10)$$

Уравнение (9) с учетом первого уравнения (6) примет вид:

$$\frac{1}{1-\phi} \frac{\partial \phi}{\partial t} = -a_1(\phi) (p_{tot} - p_f).$$

Однако его удобнее переписать в следующей форме:

$$p_{tot} - p_f = -\frac{\partial G(\phi)}{\partial t}, \quad (11)$$

где функция $G(\phi)$ определяется следующим равенством

$$\frac{dG}{d\phi} = \frac{1}{a_1(\phi)(1-\phi)}.$$

Продифференцировав уравнение (11) по переменной x , а также используя уравнение (8), при подстановке в уравнение (10) получим

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\phi}{1-\phi} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(k(\phi) (1-\phi) \left(\frac{\partial^2 G(\phi)}{\partial x \partial t} - g(\rho_s - \rho_f) \right) \right). \quad (12)$$

Согласно постановке с учетом условий протекания начальные и граничные условия записываются в виде:

$$\begin{aligned} \phi|_{t=0} &= \phi^0, \\ \left(k(\phi)(1-\phi) \left(\frac{\partial^2 G(\phi)}{\partial x \partial t} - g(\rho_s - \rho_f) \right) + q_D \right) |_{x=0,1} &= 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Лемма. Пусть данные задачи (12), (13) удовлетворяют условиям теоремы. Тогда существует единственное локальное решение задачи (12), (13), т.е. существует значение t_0 такое, что

$$\phi \in C^{2+\alpha, 1+\beta}(Q_{t_0}), \quad \phi \in (0, 1).$$

Для доказательства леммы рассмотрим следующую вспомогательную задачу:

$$z \equiv \frac{\partial G}{\partial t}, \quad G|_{t=0} = G(\phi^0) \equiv G^0(x), \quad (14)$$

$$\frac{z}{d(G)} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a(G) \frac{\partial z}{\partial x} - b(G) \right) = 0, \quad (15)$$

$$\left(a(G) \frac{\partial z}{\partial x} - b(G) + q_D \right) \Big|_{x=0, x=1} = 0, \quad (16)$$

где

$$d(G) = \frac{1 - \phi(G)}{a_1(\phi(G))}, \quad a(G) = k(\phi(G))(1 - \phi(G)),$$

$$b(G) = k(\phi(G))g(1 - \phi(G))(\rho_s - \rho_f).$$

Заметим, что поскольку $0 < m_0 \leq \phi^0(x) \leq M_0 < 1$ и функция $G(\phi)$ монотонна по ϕ , то $G(m_0) \leq G^0(x) \leq G(M_0)$.

Докажем разрешимость задачи в малом по времени с помощью теоремы Тихонова–Шаудера о неподвижной точке [12].

Пусть $\omega(x, t) = G(\phi) - G(\phi^0)$. Тогда уравнения (14), (15) можно переписать в виде:

$$z = \frac{\partial \omega}{\partial t}, \quad \omega|_{t=0} = 0, \quad (18)$$

$$\frac{z}{d(\omega)} - \frac{\partial}{\partial x} \left(a(\omega) \frac{\partial z}{\partial x} - b(\omega) \right) = 0, \quad (19)$$

$$\left(a(\omega) \frac{\partial z}{\partial x} - b(\omega) \right) \Big|_{x=0, x=1} = -q_D|_{x=0,1}. \quad (20)$$

Выберем в качестве банахова пространства $C^{2+\zeta, 1+\gamma}(\bar{Q}_{t_0})$, где ζ – любое число из отрезка $(0, \alpha)$, $\alpha \in [0, 1)$, γ – любое число из отрезка $(0, \beta)$, $\beta \in [0, 1)$. Также положим

$$V = \{ \bar{\omega} \in C^{2+\alpha, 1+\beta}(\bar{Q}_{t_0}) \mid \bar{\omega}|_{t=0} = 0,$$

$$0 < \frac{m^0}{2} \leq \phi(\bar{\omega}) \leq \frac{M^0 + 1}{2} < \infty, \quad |\bar{\omega}|_{1+\alpha, (1+2\beta)/2, Q_{t_0}} \leq K_1,$$

$$|\bar{\omega}|_{2+\alpha, 1+\beta, Q_{T_0}} \leq K_1 + K_2 \},$$

где K_1 – положительная произвольная постоянная, K_2 – положительная постоянная, которая будет рассмотрена ниже. Теперь построим оператор Λ , который отображает V в себя. Пусть $\bar{\omega} \in V$. Тогда функцию $z = z(x, t)$ можно определить, используя (19) и (20) как решение задачи

$$\frac{z}{d(\bar{\omega})} - (a(\bar{\omega})z_x - b(\bar{\omega}))_x = 0, \quad (21)$$

$$(a(\bar{\omega})z_x - b(\bar{\omega})) \Big|_{x=0,1} = -q_D|_{x=0,1},$$

где

$$0 < d_1 = \frac{1 - M_0}{a_0 M_0^{\alpha_1} (1 - m_0)^{\alpha_2 - 1}} \leq d(\bar{\omega}) \leq \frac{1 - m_0}{a_0 m_0^{\alpha_1} (1 - M_0)^{\alpha_2 - 1}} = d_2,$$

$$0 < h_1 = k_0^{-1} m_0^{q_1} (1 - M_0)^{q_2+1} \leq a(\bar{\omega}) \leq k_0 M_0^{q_3} (1 - m_0)^{q_4+1} = h_2,$$

$$|b(\bar{\omega})| \leq k_0 M_0^{q_3} (1 - m_0)^{q_4} g_0 ((1 - m_0) \rho_s + (1 + M_0) \rho_f) \equiv b_2.$$

Задача (21) имеет единственное классическое решение, поскольку уравнение для z (21) является равномерно эллиптическим и $d(\bar{\omega}) > 0$. Чтобы доказать существование решения поставленной задачи, необходимо использовать технику, изложенную в [13]. Таким образом, имеет место оценка Шаудера для решения задачи (21):

$$|z|_{2+\alpha, \Omega} \leq N_1(K_1, m_0, M_0).$$

Далее для функции z покажем непрерывность по переменной t .

Введем $u = (z(x, t_2) - z(x, t_1))(t_2 - t_1)^\beta$, тогда эта функция удовлетворяет следующему равенству:

$$\begin{aligned} & a(\bar{\omega}(x, t_2))u_{xx} + a_x(\bar{\omega}(x, t_2))u_x - \frac{1}{d(\bar{\omega}(x, t_2))} = \\ & = (z_{xx}(\bar{\omega}(x, t_1))(a(\bar{\omega}(x, t_1)) - a(\bar{\omega}(x, t_2))) + z_x(\bar{\omega}(x, t_1))(a(\bar{\omega}(x, t_1)) - a(\bar{\omega}(x, t_2))) + \\ & + z(\bar{\omega}(x, t_1)) \left(\frac{1}{d(\bar{\omega}(x, t_1))} - \frac{1}{d(\bar{\omega}(x, t_2))} \right) + b_x(\bar{\omega}(x, t_2)) - b_x(\bar{\omega}(x, t_1)))(t_2 - t_1)^{-\beta}, \end{aligned}$$

так как функции $z(x, t_i)$, $(i = 1, 2)$ являются решением уравнения (21).

Из этого равенства вытекает органиченность функции u , а также оценка $|z|_{2+\alpha, \beta, Q_{t_0}} \leq N_2(K_1, m_0, M_1)$.

После нахождения функции z найдем ω из уравнения (18):

$$\omega = \int_0^t z d\tau,$$

откуда следует, что

$$|\omega|_{2+\alpha, 1+\beta, Q_{t_0}} \leq N_3(1 + t |z_{xx}|_{\alpha, \beta, Q_{t_0}}),$$

а постоянная $N_3 = N_3(K_1, m_0, M_0)$.

Далее выберем K_2 таким образом, чтобы $N_4 \leq (K_1 + K_2)/2$, где $N_4 = \max\{N_1, N_3\}$.

Тогда при $t_0 = 2(K_1 + K_2)^{-1}$ получаем оценку

$$|\omega|_{2+\alpha, 1+\beta, Q_{t_0}} \leq K_1 + K_2.$$

Также имеем оценку вида $|\omega|_{0, Q_{t_0}} \leq N_5 t_0$, которая следует из представления для функции ω . Чтобы показать, что существует достаточно малое значение t_0 , зависящее от K_1 и K_2 , такое что справедлива оценка вида $|\omega|_{1+\alpha, (1+2\beta)/2, Q_{t_0}} \leq K_1$, необходимо воспользоваться неравенством вида [12]:

$$\begin{aligned} |u|_{1+\alpha, (1+2\beta)/2, Q_{t_0}} & \leq C |u|_{2+\alpha, 1+\beta, Q_{t_0}}^c |u|_{0, Q_{t_0}}^{1-c}, \\ c & = (1 + \alpha)(2 + \alpha)^{-1}. \end{aligned}$$

Тем самым мы показали, что оператор Λ отображает множество V в себя при достаточно малых t_0 . Непрерывность оператора Λ в норме пространства $C^{2+\zeta, 1+\gamma}(\overline{Q_{t_0}})$ доказывается с использованием оценок, полученных выше. Тем самым по теореме Тихонова–Шаудера существует неподвижная точка $\omega \in V$ оператора Λ .

Далее покажем единственность решения задачи (14)–(16). Предположим, что (z_1, G_1) и (z_2, G_2) – два различных решения задачи. Тогда их разность $z = z_1 - z_2$, $G = G_1 - G_2$ – решение следующей линейной однородной системы:

$$A_0 z + A_1 G - \frac{\partial}{\partial x} \left(A_2 \frac{\partial z}{\partial x} + A_3 G \right) = 0, \quad z = \frac{\partial G}{\partial t},$$

в которой начальные и граничные условия тождественно равны нулю:

$$\left(A_2 \frac{\partial z}{\partial x} + A_3 G \right) \Big|_{x=0,1} = 0, \quad G \Big|_{t=0} = 0,$$

а коэффициенты A_i , $i = 0, \dots, 3$ принимают вид:

$$A_0 = d(G_1) > 0, \quad A_1 = \frac{z_2(d(G_2) - d(G_1))}{Gd(G_1)d(G_2)},$$

$$A_2 = a(G_1) > 0, \quad A_3 = \frac{\partial z_2}{\partial x} \frac{a(G_1) - a(G_2)}{G} - \frac{b(G_1) - b(G_2)}{G},$$

а также являются ограниченными для любых $x \in [0, 1]$, $t \in [0, T]$.

Далее умножим уравнение для z на $z(x, t)$, а результат проинтегрируем по x от 0 до 1. После некоторых преобразований получим неравенство

$$\int_0^1 z^2 dx + \int_0^1 z_x^2 dx \leq C \int_0^1 G^2 dx, \quad (22)$$

в котором C – постоянная, которая зависит от T и других исходных данных задачи.

Так как из уравнения для G вытекает неравенство

$$G^2 \leq C \int_0^t z^2 d\tau,$$

то неравенство (22) перепишется в виде:

$$\int_0^1 z^2 dx + \int_0^1 z_x^2 dx \leq C \int_0^1 \int_0^t z^2 d\tau dx.$$

Полагая $y(t) = \int_0^1 \int_0^t z^2 d\tau dx$, выводим

$$\frac{dy}{dt} \leq Cy.$$

Откуда следует $y(t) = 0$, $z = 0$, $G = 0$. Таким образом, лемма доказана.

После отыскания функции ϕ остальные функции системы могут быть определены следующим образом.

Из уравнений неразрывности (1) находим скорости фаз

$$v_f(x, t) = \frac{q_D^0(t)}{\phi} - \frac{1}{\phi} \int_0^x \frac{\partial \phi}{\partial t} d\xi \in C^{2+\alpha, \beta}(Q_{t_0}),$$

$$v_s(x, t) = -\frac{1}{1-\phi} \int_0^x \frac{\partial(1-\phi)}{\partial t} d\xi \in C^{2+\alpha, \beta}(Q_{t_0}).$$

Из уравнения (4) вытекает следующее представление:

$$p_{tot} = p^0(t) - \int_0^x \rho_{tot} g d\xi \in C^{1+\alpha, 1+\beta}(Q_{t_0}).$$

Из уравнения (3) имеем $p_e(x, t) = -\xi(\phi) \frac{\partial v_s}{\partial x} \in C^{1+\alpha, \beta}(Q_{t_0})$, тогда

$$p_f(x, t) = p_{tot} - p_e \in C^{1+\alpha, \beta}(Q_{t_0}),$$

$$p_s(x, t) = \frac{p_{tot}}{1-\phi} - \frac{\phi}{1-\phi} p_f \in C^{1+\alpha, \beta}(Q_{t_0}).$$

Теорема доказана.

Заключение

Рассмотрена начально-краевая задача для системы одномерного движения вязкой жидкости в деформируемой вязкой пористой среде с проницаемыми границами. Исходная система уравнений в переменных Лагранжа сводится к одному уравнению третьего порядка для функции пористости. С помощью теоремы Тихонова–Шаудера о неподвижной точке доказывается локальная теорема существования и единственности задачи в классах Гёльдера в случае несжимаемой жидкости. Установлен также физический принцип максимума функции пористости.

Для данной постановки остается ряд открытых задач. Одна из них – проблема существования и единственности глобального решения поставленной задачи, а также вопросы существования решений в многомерном случае и в случае сжимаемой жидкости. Открытым остается и вопрос о стабилизации решений. Большое прикладное значение имеют задача двухфазной фильтрации в пороупругой среде и задачи с фазовыми переходами, которые позволяют описать процессы выхода магмы на поверхность земли, фильтрации газированной жидкости в пороупругой среде. Модели двухфазной фильтрации с фазовыми переходами позволят описать процессы, происходящие в биологических тканях, например рост опухоли, а также фильтрацию физиологических жидкостей в тканях. Для такого ряда задач необходимо не только доказать теоремы существования и единственности и выполнение необходимых физических требований типа неотрицательности давления (плотности) и ограниченности функции пористости нулем и единицей, но и исследовать асимптотическое поведение решений при неограниченном возрастании времени, а также устойчивость решений.

Список источников

1. Ivanov M.I., Kremer I.A., Laevsky Y.M. On non-uniqueness of pressures in problems of fluid filtration in fractured-porous media // Journal of Computational and Applied Mathematics. 2023. V. 425. Art. 115052. doi: 10.1016/j.cam.2022.115052
2. Head M., Hickey J., Thompson J., Gottsmann J., Fournier N. Rheological Controls on Magma Reservoir Failure in a Thermo-Viscoelastic Crust // Journal of Geophysical Research: Solid Earth. 2022. V. 127 (7). doi: 10.1029/2021JB023439

3. Lee J.J.E. *Modelling and Simulation of Compacting Sedimentary Basins*. University of Oxford, 2019.
4. Исламов Д.Ф., Рамазанов А.Ш. Исследование неизотермической двумерной фильтрации в слоистом пласте // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2022. № 75. С. 100–112. doi: 10.17223/19988621/75/9
5. Вириц Р.А. Численное решение двумерной задачи фильтрации жидкости в деформируемой пористой среде // Известия Алтайского государственного университета. Математика и механика. 2021. № 1. Р. 88–92. (117). doi: 10.14258/izvasu(2021)1-14
6. Morency C., Huismans R.S., Beaumont C., Fullsack P. A numerical model for coupled fluid flow and matrix deformation with applications to disequilibrium compaction and delta stability // *Journal of Geophysical Research*. 2007. V. 112 (B10). doi: 10.1029/2006JB004701
7. Fowler A. *Mathematical Geoscience*. London : Springer-Verlag London Limited, 2011. doi: 10.1007/978-0-85729-721-1
8. Tokareva M.A., Papin A.A., Virts R.A. Filtration of liquid in a non-isothermal viscous porous medium // *Journal of Siberian Federal University – Mathematics and Physics*. 2020. V. 13 (6). P. 763–773. doi: 10.17516/1997-1397-2020-13-6-763-773
9. Koleva M.N., Vulkov L.G. Numerical analysis of one dimensional motion of magma without mass forces // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2020. V. 366. doi: 10.1016/j.cam.2019.07.003
10. Ладыженская О.А., Солонников В.А., Уралъцева Н.М. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа. М. : Наука, 1967. 736 с.
11. Papin A.A., Tokareva M.A. On the existence of global solution of the system of equations of one-dimensional motion of a viscous liquid in a deformable viscous porous medium // *Siberian Electronic Mathematical Reports*. 2021. V. 18 (2). P. 1397–1422. doi: 10.33048/semi.2021.18.106
12. Антонцев С.Н., Кажихов А.В., Монахов В.Н. Краевые задачи механики неоднородных жидкостей. Новосибирск : Наука, 1983.
13. Ладыженская О.А., Уралъцева Н.М. Линейные и квазилинейные уравнения эллиптического типа. М. : Наука, 1973.

References

1. Ivanov M.I., Kremer I.A., Laevsky Y.M. (2023) On non-uniqueness of pressures in problems of fluid filtration in fractured-porous media. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 425. doi: 10.1016/j.cam.2022. 115052
2. Head M., Hickey J., Thompson J., Gottsmann J., Fournier N. (2022) Rheological controls on magma reservoir failure in thermo-viscoelastic crust. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth*. 127(7). doi: 10.1029/2021JB023439
3. Lee J.J.E. (2019) *Modelling and Simulation of Compacting Sedimentary Basins*. University of Oxford.
4. Islamov D.F., Ramazanov A.Sh. (2022) Issledovanie neizotermicheskoy dvumernoy fil'tratsii v sloistom plaste [Investigation of nonisothermal two-dimensional filtration in multylayer reservoir]. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 75. pp. 100–112. doi: 10.17223/19988621/75/9
5. Virts R.A. (2021) Chislennoe reshenie dvumernoy zadachi fil'tratsii zhidkosti v deformiruemyy poristoy srede [Numerical solution of a two-dimensional problem of fluid filtration in a deformable porous medium]. *Izvestiya AGU. Matematika i mekhanika – Izvestiya of Altai State University. Mathematics and Mechanics*. 1(117). pp. 88–92. doi: 10.14258/izvasu(2021)1-14
6. Morency C., Huismans R.S., Beaumont C., Fullsack P. (2007) A numerical model for coupled fluid flow and matrix deformation with applications to disequilibrium compaction and delta stability. *Journal of Geophysical Research*. 112. doi: 10.1029/2006JB004701

7. Fowler A. (2011) *Mathematical Geoscience*. London: Springer-Verlag. doi: 10.1007/978-0-85729-721-1
8. Tokareva M.A., Papin A.A., Virts R.A. (2020) Filtration of liquid in a non-isothermal viscous porous medium. *Journal of Siberian Federal University – Mathematics and Physics*. 13(6). pp. 763–773. doi: 10.17516/1997-1397-2020-13-6-763-773
9. Koleva M.N., Vulkov L.G. (2020) Numerical analysis of one dimensional motion of magma without mass forces. *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 366. doi: 10.1016/j.cam.2019.07.003
10. Ladyzhenskaya O.A., Solonnikov V.A., Ural'tseva N.M. (1967) *Lineynye i kvazilineynye uravneniya parabolicheskogo tipa* [Linear and quasi-linear equations of parabolic type]. Moscow: Nauka.
11. Papin A.A., Tokareva M.A. (2021) On the existence of global solution of the system of equations of one-dimensional motion of a viscous liquid in a deformable viscous porous medium. *Siberian Electronic Mathematical Reports*. 18(2). pp. 1397–1422. doi: 10.33048/semi.2021.18.106
12. Antontsev S.N., Kazhikhov A.V., Monakhov V.N. (1983) *Kraevye zadachi mekhaniki neodnorodnykh zhidkostey* [Boundary value problems in mechanics of nonhomogeneous fluids]. Novosibirsk: Nauka.
13. Ladyzhenskaya O.A., Ural'tseva N.M. (1973) *Lineynye i kvazilineynye uravneniya ellipticheskogo tipa* [Linear and quasi-linear equations of elliptic type]. Moscow: Nauka.

Сведения об авторах:

Папин Александр Алексеевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой дифференциальных уравнений Института математики и информационных технологий Алтайского государственного университета (Барнаул, Россия). E-mail: papin@math.asu.ru

Токарева Маргарита Андреевна – кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры дифференциальных уравнений Института математики и информационных технологий Алтайского государственного университета (Барнаул, Россия). E-mail: tma25@mail.ru

Information about the authors:

Papin Aleksandr A. (Doctor of Physics and Mathematics, Altai State University, Barnaul, Russian Federation). E-mail: papin@math.asu.ru

Tokareva Margarita A. (Candidate of Physics and Mathematics, Altai State University, Barnaul, Russian Federation). E-mail: tma25@mail.ru

Статья поступила в редакцию 19.07.2023; принята к публикации 05.08.2024

The article was submitted 19.07.2023; accepted for publication 05.08.2024

Научная статья

УДК 539.3

doi: 10.17223/19988621/90/13

Связанная неосесимметричная нестационарная задача термоупругости для длинного цилиндра

Дмитрий Аверкиевич Шляхин¹, Владимир Андреевич Юрин²,
Олеся Викторовна Ратманова³

^{1, 2, 3} Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

¹ d-612-mit2009@yandex.ru

² get8ack@mail.ru

³ ratmanova654@mail.ru

Аннотация. Построено новое замкнутое решение задачи термоупругости для длинного анизотропного цилиндра при нестационарном изменении температуры на его внутренней поверхности. Математическая формулировка задачи включила в себя уравнения равновесия и нестационарное уравнение теплопроводности. При решении использовано обобщенное биортогональное преобразование, позволяющее исследовать несамосопряженную систему уравнений. Полученные расчетные соотношения дали возможность определить температурное поле, а также напряженно-деформированное состояние цилиндра.

Ключевые слова: неосесимметричная задача термоупругости, длинный анизотропный цилиндр, конечные биортогональные преобразования

Для цитирования: Шляхин Д.А., Юрин В.А., Ратманова О.В. Связанная неосесимметричная нестационарная задача термоупругости для длинного цилиндра // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. 2024. № 90. С. 152–166. doi: 10.17223/19988621/90/13

Original article

A coupled non-axisymmetric non-stationary problem of the thermoelasticity of a long cylinder

Dmitriy A. Shlyakhin¹, Vladimir A. Yurin², Olesya V. Ratmanova³

^{1, 2, 3} Samara State Technical University, Samara, Russian Federation

¹ d-612-mit2009@yandex.ru

² get8ack@mail.ru

³ ratmanova654@mail.ru

Abstract. Inhomogeneous non-stationary heating of constructions of various purposes induces thermal strains and stresses that should be considered in the comprehensive analysis of elastic systems. The mathematical formulation of the considered linear three-dimensional thermoelasticity problems includes coupled non-self-adjoint differential

equations of motion and thermal conductivity. Due to their integration difficulty, axisymmetric problems are usually analyzed instead.

The purpose of this work is to develop a solution algorithm for the coupled non-axisymmetric non-stationary problem of the thermoelasticity of a long cylinder. On the internal surface of the hollow anisotropic cylinder, the temperature variation function is known; on the external surface, the convective heat transfer and environmental temperature are given. The rate of the temperature load does not affect the inertial characteristics of the cylinder. Therefore, the equilibrium and heat equations can be added to the initial system of linear equations.

The finite Fourier sine and cosine transforms and general biorthogonal transforms are used to study a non-self-adjoint system of differential equations and to develop a closed solution. The obtained solution allows one to determine the temperature field and the stress-strain state of a cylinder with its internal surface affected by non-stationary non-axisymmetric loading in terms of the temperature variation function.

Keywords: non-axisymmetric problem of thermoelasticity, long anisotropic cylinder, finite biorthogonal transforms

For citation: Shlyakhin, D.A., Yurin, V.A., Ratmanova, O.V. (2024) A coupled non-axisymmetric non-stationary problem of the thermoelasticity of a long cylinder. *Vestnik Tomskogo gosudarstvennogo universiteta. Matematika i mekhanika – Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics*. 90. pp. 151–166. doi: 10.17223/19988621/90/13

Введение

Неравномерный нестационарный нагрев строительных конструкций приводит к возникновению тепловых деформаций, которые необходимо учитывать при определении прочностных характеристик упругих систем [1, 2]. При этом математическая формулировка задач термоупругости сводится к системе связанных несамосопряженных дифференциальных уравнений движения и теплопроводности [3–6].

В целях упрощения их интегрирования обычно исследуются осесимметричные задачи [7–15]. Здесь в первую очередь следует отметить статьи [14–15], в которых был разработан новый подход к решению подобных задач. В неосесимметричном случае замкнутые решения представлены в немногих работах. В статьях [16–17] в несвязанной постановке при действии статической температурной «нагрузки» построены замкнутые решения для длинного цилиндра и цилиндра конечных размеров. Исследование [18] посвящено анализу работы радиально-неоднородного цилиндра.

Цель данной работы – построение замкнутого решения связанной нестационарной неосесимметричной задачи термоупругости для длинного анизотропного цилиндра с учетом граничных условий 1-го и 3-го родов. Скорость изменения температурной «нагрузки» не влияет на его инерционные характеристики, что позволяет включить в исходную систему уравнения равновесия и теплопроводности.

Постановка задачи

Полый длинный анизотропный цилиндр (рис. 1) занимает в цилиндрической системе координат область $\Sigma = \{(r^*, \varphi, z) \mid r^* \in [a; b], \varphi \in [0; 2\pi), z \in \mathbf{R}\}$. На его внутренней поверхности известна функция изменения температуры $\omega_1^*(\varphi, t^*)$, а на

внешней заданы закон конвекционного теплообмена и температура окружающей среды ϑ^* .

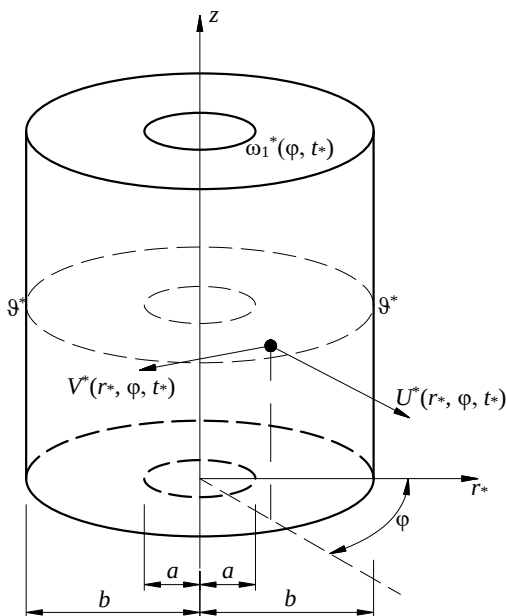


Рис. 1. Схема задачи
Fig. 1. Schematic model of the problem

Математическая формулировка задачи включает неосесимметричные дифференциальные уравнения равновесия, теплопроводности, а также граничные и начальные условия [19]:

$$\left(\nabla \frac{\partial}{\partial r} - \frac{a_1}{r^2} + a_2 \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) U + \frac{1}{r} \left[(a_2 + a_3) \frac{\partial}{\partial r} - \frac{(a_1 + a_2)}{r} \right] \frac{\partial V}{\partial \varphi} + \left(\frac{a_4}{r} - \nabla \right) \Theta = 0, \quad (1)$$

$$\frac{1}{r} \left(a_2 \nabla + a_3 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{a_1}{r} \right) \frac{\partial U}{\partial \varphi} + \left(a_2 \nabla \frac{\partial}{\partial r} + \frac{a_1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{a_2}{r^2} \right) V - a_4 \frac{1}{r} \frac{\partial \Theta}{\partial \varphi} = 0,$$

$$\left(\nabla \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) \Theta - \frac{\partial}{\partial t} \left(\Theta + a_5 \nabla U + a_5 \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial \varphi} \right) = 0;$$

$$r = R, 1: \quad \frac{\partial U}{\partial r} + \frac{a_3}{r} \left(U + \frac{\partial V}{\partial \varphi} \right) - \Theta = 0, \quad \frac{1}{r} \frac{\partial U}{\partial \varphi} + \frac{\partial V}{\partial r} - \frac{V}{r} = 0, \quad (2)$$

$$\Theta|_{r=R} = \omega_1, \quad \left(\frac{\partial \Theta}{\partial r} + a_6 \Theta \right) \Big|_{r=1} = a_6 \vartheta;$$

$$m \in [1; \infty): \quad \{U, V, \Theta\}_{|\varphi=0} = \{U, V, \Theta\}_{|\varphi=2\pi m}, \quad \frac{\partial \{U, V, \Theta\}}{\partial \varphi} \Big|_{|\varphi=0} = \frac{\partial \{U, V, \Theta\}}{\partial \varphi} \Big|_{|\varphi=2\pi m}; \quad (3)$$

$$t = 0: \quad U = V = \Theta = 0, \quad (4)$$

$$\text{где} \quad \{U, V, r, R\} = \{U^*, V^*, r_*, a\} / b; \quad (5)$$

$$\{\Theta, \omega_1, \vartheta\} = \frac{\gamma_{33}}{c_{33}} \{\Theta^* - T_0, \omega_1^* - T_0, \vartheta^* - T_0\};$$

$$\gamma_{33} = c_{33}\alpha_t; \quad \gamma_{11} = c_{11}\alpha_t; \quad t = \frac{\Lambda}{kb^2} t_*; \quad a_1 = \frac{c_{11}}{c_{33}}; \quad a_2 = \frac{c_{44}}{c_{33}};$$

$$a_3 = \frac{c_{13}}{c_{33}}; \quad a_4 = \frac{\gamma_{11}}{\gamma_{33}}; \quad a_5 = T_0 \frac{\gamma_{33}^2}{c_{33}k}; \quad a_6 = \alpha \frac{b}{\Lambda}; \quad \nabla = \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r}.$$

В выражениях (5) $U^*(r^*, \varphi, t^*)$, $V^*(r^*, \varphi, t^*)$, $\Theta^*(r^*, \varphi, t^*)$ – радиальные и окружные перемещения, а также температура тела в размерной форме; γ_{11} , γ_{33} – температурные напряжения; c_{ms} – модули упругости; $T_0(r^*)$ – начальная температура тела; α_t – коэффициент линейного температурного расширения материала; Λ , k , α – коэффициенты теплопроводности, объемной теплоемкости и теплоотдачи.

Соотношения (3) являются условиями периодичности для круговой области. В начальный момент времени (4) цилиндр находится в недеформированном состоянии, а его температурное поле определяется температурой первоначального состояния $T_0(r^*)$.

Построение общего решения

Решение нестационарной задачи термоупругости начинается с неполного разделения переменных с помощью конечного косинус- и синус-преобразования Фурье [20] при использовании трансформант

$$\{U_H(r, n, t), \Theta_H(r, n, t)\} = \int_0^{2\pi} \{U(r, \varphi, t), \Theta(r, \varphi, t)\} \cos(n\varphi) d\varphi, \quad (6)$$

$$V_H(r, n, t) = \int_0^{2\pi} V(r, \varphi, t) \sin(n\varphi) d\varphi$$

и формул обращения

$$\{U(r, \varphi, t), \Theta(r, \varphi, t)\} = \sum_{n=0}^{\infty} \Omega_n \{U_H(r, n, t), \Theta_H(r, n, t)\} \cos(n\varphi) d\varphi, \quad (7)$$

$$V(r, \varphi, t) = \pi^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} V_H(r, n, t) \sin(n\varphi) d\varphi,$$

причем при $n = 0$: $\Omega_n = (2\pi)^{-1}$; $n \neq 0$: $\Omega_n = \pi^{-1}$.

Применение алгоритма преобразования с учетом условия периодичности решения (3) позволяет получить в пространстве изображений следующую начальную-краевую задачу:

$$\nabla \frac{\partial U_H}{\partial r} - (a_1 + a_2 n^2) \frac{U_H}{r^2} + (a_3 + a_2) n \frac{1}{r} \frac{\partial V_H}{\partial r} - (a_2 + a_1) n \frac{V_H}{r^2} + a_4 \frac{\Theta_H}{r} - \nabla \Theta_H = 0, \quad (8)$$

$$- \frac{n}{r} \left(a_2 \nabla U_H + a_3 \frac{\partial U_H}{\partial r} + a_1 \frac{U_H}{r} \right) + a_2 \nabla \frac{\partial V_H}{\partial r} - (a_1 n^2 + a_2) \frac{V_H}{r^2} + a_4 n \frac{\Theta_H}{r} = 0,$$

$$\left(\nabla \frac{\partial}{\partial r} - \frac{n^2}{r^2} \right) \Theta_H - \frac{\partial}{\partial t} \left(\Theta_H + a_5 \nabla U_H + a_5 \frac{n}{r} V_H \right) = 0;$$

$$r = R, 1: \quad \frac{\partial U_H}{\partial r} + a_3 \frac{U_H}{r} + a_3 n \frac{V_H}{r} - \Theta_H = 0, \quad n \frac{U_H}{r} - \frac{\partial V_H}{\partial r} + \frac{V_H}{r} = 0, \quad (9)$$

$$\Theta_H|_{r=R} = \omega_{1H}, \quad \left(\frac{\partial \Theta_H}{\partial r} + a_6 \Theta_H \right)_{|r=1} = a_6 \vartheta_H;$$

$$t = 0: \quad U_H = V_H = \Theta_H = 0, \quad (10)$$

$$\text{где} \quad \{\omega_{1H}(n, t), \vartheta_H\} = \int_0^{2\pi} \{\omega_1(\varphi, t), \vartheta\} \cos(n\varphi) d\varphi.$$

Приведение неоднородных граничных условий (9) к однородным реализуется при использовании разложения:

$$U_H(r, n, t) = H_1(r, n, t) + u_H(r, n, t), \quad (11)$$

$$V_H(r, n, t) = H_2(r, n, t) + v_H(r, n, t),$$

$$\Theta_H(r, n, t) = H_3(r, n, t) + T_H(r, n, t);$$

$$\{H_1(r, n, t), H_2(r, n, t), H_3(r, n, t)\} = \{f_1(r), f_3(r), f_5(r)\} \omega_{1H}(n, t) + \{f_2(r), f_4(r), f_6(r)\} \vartheta_H,$$

где $f_1(r) \dots f_6(r)$ – дважды дифференцируемые функции.

Подстановка (11) в (8)–(10) при выполнении условий

$$r = R, 1: \quad \frac{\partial H_1}{\partial r} + a_3 \frac{H_1}{r} + a_3 n \frac{H_2}{r} - H_3 = 0, \quad n \frac{H_1}{r} - \frac{\partial H_2}{\partial r} + \frac{H_2}{r} = 0, \quad (12)$$

$$H_3|_{r=R} = \omega_{1H}, \quad \left(\frac{\partial H_3}{\partial r} + a_6 H_3 \right)_{|r=1} = a_6 \vartheta_H$$

позволяет получить новую систему относительно функций u_H, v_H, T_H с однородными граничными условиями

$$\nabla \frac{\partial u_H}{\partial r} - (a_1 + a_2 n^2) \frac{u_H}{r^2} + (a_3 + a_2) n \frac{1}{r} \frac{\partial v_H}{\partial r} - (a_2 + a_1) n \frac{v_H}{r^2} + a_4 \frac{T_H}{r} - \nabla T_H = F_1, \quad (13)$$

$$- \frac{n}{r} \left(a_2 \nabla u_H + a_3 \frac{\partial u_H}{\partial r} + a_1 \frac{u_H}{r} \right) + a_2 \nabla \frac{\partial v_H}{\partial r} - (a_1 n^2 + a_2) \frac{v_H}{r^2} + a_4 n \frac{T_H}{r} = F_2,$$

$$\left(\nabla \frac{\partial}{\partial r} - \frac{n^2}{r^2} \right) T_H - \frac{\partial}{\partial t} \left(T_H + a_5 \nabla u_H + a_5 n \frac{v_H}{r} \right) = F_3;$$

$$r = R, 1: \quad \frac{\partial u_H}{\partial r} + a_3 \frac{u_H}{r} + a_3 n \frac{v_H}{r} - T_H = 0, \quad n \frac{u_H}{r} - \frac{\partial v_H}{\partial r} + \frac{v_H}{r} = 0, \quad (14)$$

$$T_H|_{r=R} = 0, \quad \left(\frac{\partial T_H}{\partial r} + a_6 T_H \right)_{|r=1} = 0;$$

$$t = 0: \quad \{u_H, v_H, T_H\} = \{u_{0H}, v_{0H}, T_{0H}\}, \quad (15)$$

$$\text{где} \quad F_1 = -\nabla \frac{\partial H_1}{\partial r} + (a_1 + a_2 n^2) \frac{H_1}{r^2} - \frac{(a_3 + a_2) n}{r} \frac{\partial H_2}{\partial r} + (a_2 + a_1) n \frac{H_2}{r^2} - a_4 \frac{H_3}{r} + \nabla H_3;$$

$$F_2 = \frac{n}{r} \left(a_2 \nabla H_1 + a_3 \frac{\partial H_1}{\partial r} + a_1 \frac{H_1}{r} \right) - a_2 \nabla \frac{\partial H_2}{\partial r} + (a_1 n^2 + a_2) \frac{H_2}{r^2} - a_4 n \frac{H_3}{r};$$

$$F_3 = - \left(\nabla \frac{\partial}{\partial r} - \frac{n^2}{r^2} \right) H_3 + \frac{\partial}{\partial t} \left(H_3 + a_5 \nabla H_1 + a_5 n \frac{H_2}{r} \right);$$

$$\{u_{0H}, v_{0H}, T_{0H}\} = -\{H_1(r, n, 0), H_2(r, n, 0), H_3(r, n, 0)\}.$$

Полученная задача (13)–(15) решается методом биортогонального конечного интегрального преобразования (КИП) [21–23]. Для этого вводится КИП с неизвестными компонентами собственных вектор-функций $K_1(\lambda_{in}, r) \dots K_3(\lambda_{in}, r)$ и $N_1(\mu_{in}, r) \dots N_3(\mu_{in}, r)$:

$$G(\lambda_{in}, n, t) = \int_R \left[T_H + T_H + a_5 \nabla u_H + a_5 n \frac{v_H}{r} \right] r K_3(\lambda_{in}, r) dr, \quad (16.1)$$

$$\{u_H, v_H, T_H\} = \sum_{i=1}^{\infty} G(\lambda_{in}, n, t) \frac{\{N_1(\mu_{in}, r), N_2(\mu_{in}, r), N_3(\mu_{in}, r)\}}{\|K_{in}\|^2}, \quad (16.2)$$

$$\|K_{in}\|^2 = \int_R K_3(\lambda_{in}, r) N_3(\mu_{in}, r) r dr,$$

где λ_{in} , μ_{in} – собственные значения соответствующих однородных задач относительно $K_k(\lambda_{in}, r)$ и $N_k(\mu_{in}, r)$ при $k = 1 \dots 3$.

Согласно алгоритму преобразования формируется счетное множество задач для трансформанты $G(\lambda_{in}, n, t)$:

$$i \in [1; \infty); n \in [0; \infty); \left(\frac{d}{dt} + \lambda_{in}^2 \right) G(\lambda_{in}, n, t) = F_H(\lambda_{in}, n, t); \quad (17)$$

$$t = 0: G(\lambda_{in}, n, t) = G_{0H}. \quad (18)$$

Их решение имеет вид:

$$G(\lambda_{in}, n, t) = G_{0H} \exp(-\lambda_{in}^2 t) + \int_0^t F_H(\lambda_{in}, n, \tau) \exp[\lambda_{in}^2 (\tau - t)] d\tau, \quad (19)$$

$$F_H(\lambda_{in}, n, t) = - \int_R (F_1 K_{1in} + F_2 K_{2in} + F_3 K_{3in}) r dr,$$

$$G_{0H} = (T_{0H} + a_5 \nabla u_{0H}) K_{3in} r dr,$$

где

$$K_{k,in} = K_k(\lambda_{in}, r); N_{k,in} = N_k(\mu_{in}, r).$$

Кроме того, формируются две однородные задачи. Первая – относительно $K_{k,in}$:

$$\nabla \frac{dK_{1in}}{dr} - (a_1 + a_2 n^2) \frac{K_{1in}}{r^2} + (a_2 + a_3) n \frac{1}{r} \frac{dK_{2in}}{dr} - (a_1 + a_2) n \frac{K_{2in}}{r^2} - a_5 \lambda_{in}^2 \frac{dK_{3in}}{dr} = 0, \quad (20)$$

$$a_2 \nabla \frac{dK_{2in}}{dr} - (a_1 n^2 + a_2) \frac{K_{2in}}{r^2} - (a_3 + a_2) n \frac{1}{r} \frac{dK_{1in}}{dr} - (a_2 + a_1) n \frac{K_{1in}}{r^2} + \lambda_{in}^2 a_5 n \frac{K_{3in}}{r} = 0,$$

$$\nabla \frac{dK_{3in}}{dr} - n^2 \frac{K_{3in}}{r^2} + a_4 \frac{K_{1in}}{r} + \frac{dK_{1in}}{dr} + a_4 n \frac{K_{2in}}{r} + \lambda_{in}^2 K_{3in} = 0;$$

$$r = R, 1: \frac{dK_{1in}}{dr} + a_3 \frac{K_{1in}}{r} + a_3 n \frac{K_{2in}}{r} - a_5 \lambda_{in}^2 K_{3in} = 0, \quad n \frac{K_{1in}}{r} - \frac{dK_{2in}}{dr} + \frac{K_{2in}}{r} = 0, \quad (21)$$

$$K_{3in}|_{r=R} = 0, \quad \left(\frac{dK_{3in}}{dr} + a_6 K_{3in} \right) \Big|_{r=1} = 0.$$

Вторая – относительно $N_{k,in}$:

$$\nabla \frac{dN_{1in}}{dr} - (a_1 + a_2 n^2) \frac{N_{1in}}{r^2} + (a_3 + a_2) n \frac{1}{r} \frac{dN_{2in}}{dr} - (a_2 + a_1) n \frac{N_{2in}}{r^2} + a_4 \frac{N_{3in}}{r} - \nabla N_{3in} = 0, \quad (22)$$

$$\begin{aligned}
 & -\frac{n}{r} \left(a_2 \nabla N_{1in} + a_3 \frac{dN_{1in}}{dr} + a_1 \frac{N_{1in}}{r} \right) + a_2 \nabla \frac{dN_{2in}}{dr} - \left(a_1 n^2 + a_2 \right) \frac{N_{2in}}{r^2} + a_4 n \frac{N_{3in}}{r} = 0, \\
 & \nabla \frac{dN_{3in}}{dr} - n^2 \frac{N_{3in}}{r^2} + \mu_{in}^2 \left(N_{3in} + a_5 \nabla N_{1in} + a_5 n \frac{N_{2in}}{r} \right) = 0; \\
 r = R, 1: \quad & \frac{dN_{1in}}{dr} + a_3 \frac{N_{1in}}{r} + a_3 n \frac{N_{2in}}{r} - N_{3in} = 0, \quad n \frac{N_{1in}}{r} - \frac{dN_{2in}}{dr} + \frac{N_{2in}}{r} = 0, \\
 & N_{3in}|_{r=R} = 0, \quad \left(\frac{dN_{3in}}{dr} + a_6 N_{3in} \right) \Big|_{r=1} = 0.
 \end{aligned} \tag{23}$$

В системах (20)–(21) и (22)–(23) связанность полей осуществляется за счет коэффициентов $a_5 \lambda_{in}^2$ и $a_5 \mu_{in}^2$. С учетом того, что для твердых материалов параметр $a_5 \ll 1$, а собственные значения для первых членов ряда ($i = 1 \dots 7$) достаточно малы, связанность полей можно не учитывать и принять $a_5 = 0$.

Рост номера ряда приводит к увеличению λ_{in} , μ_{in} и образованию члена ряда, которым можно пренебречь вследствие его малости.

В результате при решении однородных задач (20)–(21) и (22)–(23) получаются следующие выражения функций $K_{k,in}$ и $N_{k,in}$ ($k = 1 \dots 3$):

$$K_1(\lambda_{in}, r) = \sum_{p=1}^4 D_{pn} r^{m_p}, \quad K_2(\lambda_{in}, r) = \sum_{p=1}^4 D_{pn} A_{pn} r^{m_p}, \tag{24}$$

$$K_3(\lambda_{in}, r) = -\sum_{p=1}^4 D_{pn} (m_p + a_4 + a_4 n A_{pn}) \lambda_{in}^{-m_p-1} G_{n,m_p}(\lambda_{in} r) + D_{5n} J_n(\lambda_{in} r) + D_{6n} Y_n(\lambda_{in} r),$$

$$N_1(\mu_{in}, r) = \sum_{p=1}^4 E_{pn} r^{m_p} + \sum_{p=1}^4 V_p(r) r^{m_p},$$

$$N_2(\mu_{in}, r) = \sum_{p=1}^4 E_{pn} A_{pn} r^{m_p} + \sum_{p=1}^4 V_p(r) A_p r^{m_p},$$

$$N_3(\mu_{in}, r) = E_{5n} J_n(\mu_{in} r) + E_{6n} Y_n(\mu_{in} r),$$

где
$$V_1(r) = -\frac{A_{9n}}{(b_{2n} - b_{1n})} \left[N_{3in} r^{1-m_1} + \left(\frac{a_4 b_{2n}}{a_2 b_{3n}} n - a_4 + m_1 \right) \int N_{3in} r^{-m_1} dr \right],$$

$$V_2(r) = \frac{A_{9n}}{(b_{2n} - b_{1n})} \left[N_{3in} r^{1-m_2} + \left(\frac{a_4 b_{1n}}{a_2 b_{3n}} n - a_4 + m_2 \right) \int N_{3in} r^{-m_2} dr \right],$$

$$V_3(r) = -\frac{A_{5n}}{(b_{5n} - b_{4n})} \left[N_{3in} r^{1-m_3} + \left(\frac{a_4 b_{5n}}{a_2 b_{6n}} n - a_4 + m_3 \right) \int N_{3in} r^{-m_3} dr \right],$$

$$V_4(r) = \frac{A_{5n}}{(b_{5n} - b_{4n})} \left[N_{3in} r^{1-m_4} + \left(\frac{a_4 b_{4n}}{a_2 b_{6n}} n - a_4 + m_4 \right) \int N_{3in} r^{-m_4} dr \right];$$

$$b_{1n} = A_{9n} m_1 + A_{10n} m_3 - A_{8n} m_4, \quad b_{2n} = A_{9n} m_2 - A_{7n} m_3 + A_{6n} m_4,$$

$$b_{3n} = A_{1n} A_{9n} m_1 + A_{3n} A_{10n} m_3 - A_{4n} A_{8n} m_4, \quad b_{4n} = A_{5n} m_3 - A_{8n} m_2 - A_{6n} m_1,$$

$$b_{5n} = A_{5n} m_4 - A_{10n} m_2 - A_{7n} m_1, \quad b_{6n} = A_{3n} A_{5n} m_3 - A_{2n} A_{8n} m_2 - A_{1n} A_{6n} m_1;$$

$$A_{pn} = \left[(a_2 + a_3)m_p n - (a_1 + a_2)n \right]^{-1} \left[(a_1 + a_2 n^2) - m_p^2 \right] \text{ при } p = 1 \dots 4;$$

$$A_{5n} = A_{2n} - A_{1n}, \quad A_{6n} = A_{2n} - A_{3n}, \quad A_{7n} = A_{2n} - A_{4n},$$

$$A_{8n} = A_{3n} - A_{1n}, \quad A_{9n} = A_{3n} - A_{4n}, \quad A_{10n} = A_{4n} - A_{1n}.$$

В выражениях (24) J_n , Y_n – функции Бесселя I и II родов порядка n ; G_{n,m_p} – неэлементарные функции Ломмеля; $A_{1n} \dots A_{10n}$ и $b_{1n} \dots b_{6n}$ – постоянные, полученные в результате приведения (20) и (22) к разрешающим уравнениям относительно функций $K_{1,in}$ и $N_{1,in}$ соответственно; постоянные $m_1 \dots m_4$ являются корнями следующего биквадратного уравнения:

$$a_2 (m^2)^2 + e_{1n} m^2 + e_{2n} = 0, \quad (25)$$

$$e_{2n} = (a_1 n^2 + a_2)(a_2 n^2 + a_1) - n^2 (a_1 + a_2)^2,$$

$$e_{1n} = n^2 (2a_2 a_3 + a_3^2 - a_1) - a_2 (a_1 + 1).$$

Подстановка $K_{k,in}$ и $N_{k,in}$ ($k = 1 \dots 3$) в граничные условия (21), (23) позволяет определить постоянные $D_{1n} \dots D_{4n}$, $E_{1n} \dots E_{4n}$ и сформировать трансцендентные уравнения для определения собственных значений λ_{in} , μ_{in} .

Итоговые выражения для $U(r, \varphi, t)$, $V(r, \varphi, t)$, $\Theta(r, \varphi, t)$ формируются при использовании формул обращения (7), (16.2) с учетом (11):

$$U(r, \varphi, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \Omega_n \left[H_1(r, n, t) + \sum_{i=1}^{\infty} G(\lambda_{in}, n, t) N_1(\mu_{in}, r) \|K_{in}\|^{-2} \right] \cos(n\varphi) d\varphi, \quad (26)$$

$$V(r, \varphi, t) = \pi^{-1} \sum_{n=1}^{\infty} \left[H_2(r, n, t) + \sum_{i=1}^{\infty} G(\lambda_{in}, n, t) N_2(\mu_{in}, r) \|K_{in}\|^{-2} \right] \sin(n\varphi) d\varphi,$$

$$\Theta(r, \varphi, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \Omega_n \left[H_3(r, n, t) + \sum_{i=1}^{\infty} G(\lambda_{in}, n, t) N_3(\mu_{in}, r) \|K_{in}\|^{-2} \right] \cos(n\varphi) d\varphi.$$

Для определения функций $f_1(r) \dots f_6(r)$ при удовлетворении граничных условий (14) решаются следующие дифференциальные уравнения:

$$\left[\nabla \frac{d}{dr} - \frac{(a_1 + a_2 n^2)}{r^2} \right] f_p(r) + n \left[\frac{(a_2 + a_3)}{r} \frac{d}{dr} - \frac{(a_1 + a_2)}{r^2} \right] f_{p+2}(r) + \left[\frac{a_4}{r} - \nabla \right] f_{p+4}(r) = 0, \quad (27)$$

$$\frac{n}{r} \left(a_2 \nabla + a_3 \frac{d}{dr} + \frac{a_1}{r} \right) f_p(r) + \left[\frac{(a_1 n^2 + a_2)}{r^2} - a_2 \nabla \frac{d}{dr} \right] f_{p+2}(r) - a_4 n \frac{f_{p+4}(r)}{r} = 0,$$

$$\nabla \frac{df_{p+4}(r)}{dr} - n^2 \frac{f_{p+4}(r)}{r^2} = 0.$$

Анализ результатов

В качестве примера рассматривается длинный анизотропный цилиндр со следующими физико-механическими характеристиками: $b = 2 \times 10^{-2}$ м; $a = 5 \times 10^{-3}$ м; $\{c_{11}, c_{13}, c_{33}, c_{44}\} = \{13.9, 7.43, 11.5, 2.56\} \times 10^{10}$ Па; $\rho = 7\,600$ кг/м³; $k = 3 \times 10^6$ Дж/(м³ × К); $\Lambda = 1.6$ Вт/(м × К); $\alpha_t = 0.4 \times 10^{-5}$ К⁻¹.

Изменение температуры на внутренней поверхности цилиндра определяется следующей зависимостью:

$$\omega_1^*(\varphi, t_*) = Y(t_*) \left[H\left(\frac{\theta}{2} - \varphi\right) + H\left(\varphi + \frac{\theta}{2} - 2\pi\right) \right] + T_0 \left[H\left(\varphi - \frac{\theta}{2}\right) - H\left(\varphi + \frac{\theta}{2} - 2\pi\right) \right], \quad (28)$$

$$Y(t_*) = T_{\max} \left[\sin\left(\frac{\pi}{2t_{\max}^*} t_*\right) H(t_{\max}^* - t_*) + H(t_* - t_{\max}^*) \right],$$

где $\theta \in [-\pi/4; \pi/4]$ – участок, на котором изменяется температура $Y(t_*)$; $H(x) = 1$ при $x \geq 0$, $H(x) = 0$ при $x < 0$; $T_{\max}$, $t_{\max}^*$ – максимальное значение действующей температуры в соответствующий момент времени в размерной форме ($T_{\max} = 373$ К; $t_{\max}^* = 1$ с).

Температура окружающей среды ϑ^* равна температуре первоначального состояния тела ($T_0(r^*) = T_0$, $\vartheta = 0$), а коэффициент теплоотдачи материала $\alpha = 5.6$ Вт/(м² × К).

На рис. 2–6 показаны графики изменения температуры в размерной форме и перемещений по тангенциальной координате в различные моменты времени. Для лучшей сходимости рядов радиальная ось располагается в середине участка θ температурного «нагружения».

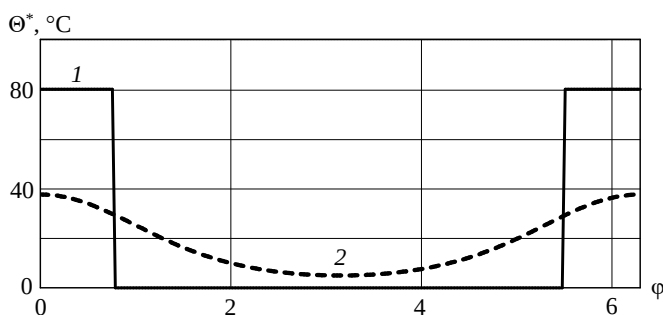


Рис. 2. Изменение $\Theta^*(r, \varphi, 500t_{\max}^*)$ по тангенциальной координате: $r = R$ (1); $r = 1$ (2)
Fig. 2. Variation of $\Theta^*(r, \varphi, 500t_{\max}^*)$ with respect to the tangential coordinate: $r =$ (1) R and (2) 1

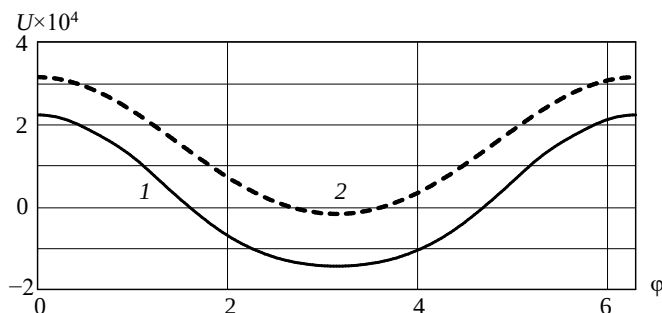


Рис. 3. Изменение $U(r, \varphi, t^*)$ по тангенциальной координате при $t^* = t_{\max}^*$: $r = R$ (1); $r = 1$ (2)
Fig. 3. Variation of $U(r, \varphi, t^*)$ with respect to the tangential coordinate for $t^* = t_{\max}^*$:
 $r =$ (1) R and (2) 1

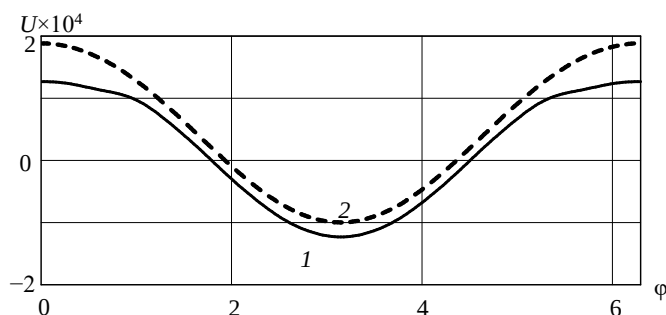


Рис. 4. Изменение $U(r, \varphi, t^*)$ по тангенциальной координате при $t^* = 500t_{\max}^*$:
 $r = R$ (1); $r = 1$ (2)

Fig. 4. Variation of $U(r, \varphi, t^*)$ with respect to the tangential coordinate for $t^* = 500t_{\max}^*$:
 $r = (1) R$ and (2) 1

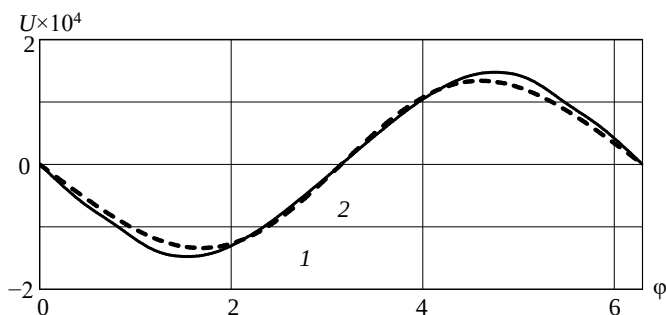


Рис. 5. Изменение $V(r, \varphi, t^*)$ по тангенциальной координате при $t^* = t_{\max}^*$: $r = R$ (1); $r = 1$ (2)

Fig. 5. Variation of $V(r, \varphi, t^*)$ with respect to the tangential coordinate for $t^* = t_{\max}^*$:
 $r = (1) R$ and (2) 1

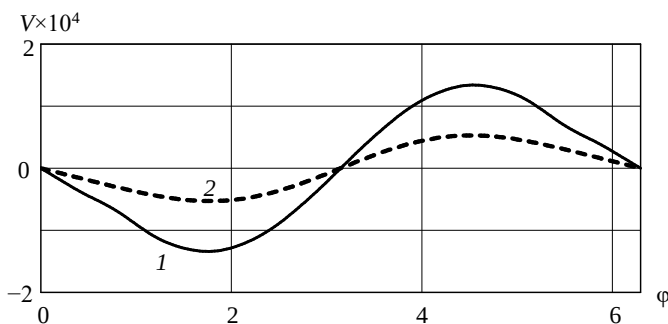


Рис. 6. Изменение $V(r, \varphi, t^*)$ по тангенциальной координате при $t^* = 500t_{\max}^*$:
 $r = R$ (1); $r = 1$ (2)

Fig. 6. Variation of $V(r, \varphi, t^*)$ with respect to the tangential coordinate for $t^* = 500t_{\max}^*$:
 $r = (1) R$ and (2) 1

По результатам расчета можно сделать следующие выводы:

1. Изменение температуры на внутренней цилиндрической поверхности (см. рис. 2, $r = R$), описываемое функцией $\omega_1^*(\varphi, t^*)$, приводит к образованию установившегося температурного режима во всем теле цилиндра при $t^* = 500t_{\max}^*$.

2. Наибольшее значение температуры на внешней поверхности наблюдается в середине участка «нагружения» ($\varphi = 0$). На других участках при $r = 1$ повышение температуры имеет меньшие значения.

3. На первом этапе изменения температурного поля ($t^* = t^*_{\max}$) разница в радиальных перемещениях цилиндрических поверхностей $U(r, \varphi, t^*)$ при $r = R$ и $r = 1$ наиболее существенна. Однако при установившемся режиме ($t^* = 500t^*_{\max}$) данная характеристика снижается (см. рис. 3, 4). Обратная картина наблюдается при определении тангенциальных перемещений $V(r, \varphi, t^*)$ (см. рис. 5, 6).

4. Наибольшие значения радиальных перемещений $U(r, \varphi, t^*)$ образуются в начальный момент времени при неустановившемся температурном режиме ($t^* = t^*_{\max}$) (см. рис. 3, $\varphi = 0$).

На рис. 7–8 представлены графики изменения окружной компоненты тензора нормальных напряжений по радиальной координате в различные моменты времени в размерной форме.

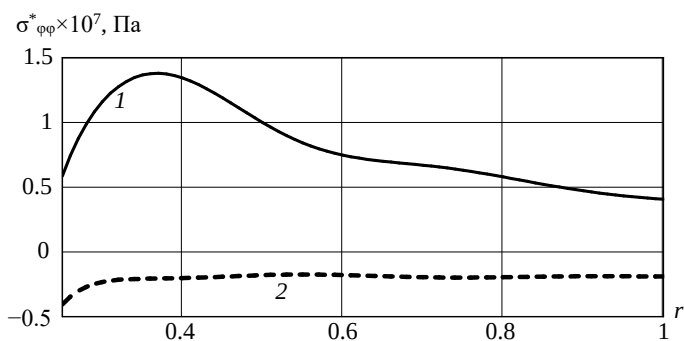


Рис. 7. Изменение $\sigma^*_{\varphi\varphi}(r, \varphi, t^*)$ по радиальной координате при $t^* = t^*_{\max}$:
 $\varphi = 0$ (1), $\varphi = \pi$ (2)

Fig. 7. Variation of $\sigma^*_{\varphi\varphi}(r, \varphi, t^*)$ with respect to the radial coordinate for $t^* = t^*_{\max}$:
 $\varphi = (1) 0$ and (2) π

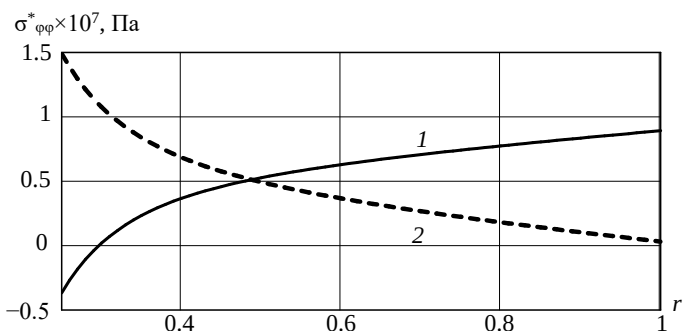


Рис. 8. Изменение $\sigma^*_{\varphi\varphi}(r, \varphi, t^*)$ по радиальной координате при $t^* = 500t^*_{\max}$:
 $\varphi = 0$ (1), $\varphi = \pi$ (2)

Fig. 8. Variation of $\sigma^*_{\varphi\varphi}(r, \varphi, t^*)$ with respect to the radial coordinate for $t^* = 500t^*_{\max}$:
 $\varphi = (1) 0$ and (2) π

По представленным графикам можно отметить следующие характерные особенности работы цилиндра:

1. На первом этапе деформирования цилиндра при $t^* = t_{\max}^*$ напряжения $\sigma_{\varphi\varphi}^*(r, \varphi, t^*)$ по радиальной координате имеют одинаковый знак. При $\varphi = 0$ – напряжения растяжения, а при $\varphi = \pi$ – напряжения сжатия (см. рис. 7).

2. При установившемся температурном режиме ($t^* = 500t_{\max}^*$) напряжения меняют свой знак при $r = 0.49$ (см. рис. 8).

3. Наибольшие напряжения наблюдаются в теле цилиндра при $t^* = t_{\max}^*$ и $r = 0.35$.

Для оценки связанности термоупругих полей, а именно влияния скорости изменения толщины стенки на температурное поле, краевые задачи (20)–(23) относительно компонент вектор-функций ядер преобразований $K_{k,in}$ и $N_{k,in}$ (при $k = 1 \dots 3$) исследовались с учетом коэффициента связанности ($a_5 = 1.79 \times 10^{-4}$) и без его учета ($a_5 = 0$). Разница между соответствующими собственными значениями λ_{in} , μ_{in} для элемента с различной толщиной стенки составила менее 0.5%.

При оценке влияния связанности полей на трансформанту «нагрузки» $G(\lambda_{in}, n, t)$ выясняется, что данное свойство необходимо учитывать, когда $a_5 \geq 10^{-2}$.

Заключение

Построено новое замкнутое решение связанной задачи термоупругости для длинного полого анизотропного цилиндра при удовлетворении граничных условий теплопроводности 1-го и 3-го родов. В отличие от несвязанной постановки задачи представленный алгоритм расчета имеет преимущества, так как при исследовании уравнения равновесия отпадает необходимость аппроксимации функции температуры, а влиянием скорости изменения толщины стенки на температурное поле цилиндра можно пренебречь.

Список источников

1. Подстригач Я.С., Ломакин В.А., Коляно Ю.М. Теплоупругость тел неоднородной структуры. М. : Наука, 1984.
2. Новацкий В. Динамические задачи термоупругости. М. : Мир, 1970.
3. Mindlin R.D. Equations of high frequency vibrations of thermopiezoelectric crystal plates // International Journal of Solids and Structures. 1974. V. 10 (6). P. 625–637. doi: 10.1016/0020-7683(74)90047-X
4. Lord H.W., Shulman Y. A generalized dynamical theory of thermoelasticity // Journal of the Mechanics and Physics of Solids. 1967. V. 15 (5). P. 299–309. doi: 10.1016/0022-5096(67)90024-5
5. Green A.E., Naghdi P.M. Thermoelasticity without energy dissipation // Journal of Elasticity. 1993. V. 31. P. 189–208. doi: 10.1016/S0307-904X(02)00078-1
6. Коваленко А.Д. Введение в термоупругость. Киев : Наукова думка, 1965. 204 с.
7. Sargsyan S.H. Mathematical Model of Micropolar Thermo-Elasticity of Thin Shells // Journal of Thermal Stresses. 2013. V. 36 (11). P. 1200–1216. doi: 10.1080/01495739.2013.819265
8. Verma K.L. Thermoelastic waves in anisotropic plates using normal mode expansion method // World Academy of Science, Engineering and Technology. 2008. V. 37. P. 573–580. doi: 10.5281/zenodo.1058727
9. Жорник А.И., Жорник В.А., Савочка П.А. Об одной задаче термоупругости для сплошного цилиндра // Известия Южного федерального университета. Технические науки. 2012. № 9 (1). С. 63–69.

10. Harmatij H., Król M., Popovycz V. Quasi-Static Problem of Thermoelasticity for Thermo-sensitive Infinite Circular Cylinder of Complex Heat Exchange // *Advances in Pure Mathematics*. 2013. V. 3 (4). P. 430–437. doi: 10.4236/apm.2013.34061
11. Ковалев В.А., Радаев Ю.Н., Семенов Д.А. Связанные динамические задачи гиперболической термоупругости // *Известия Саратовского университета. Новая серия. Сер. Математика. Механика. Информатика*. 2009. Т. 9. № 4 (2). С. 94–127. doi: 10.18500/1816-9791-2009-9-4-2-94-127
12. Шляхин Д.А., Даулетмуратова Ж.М. Нестационарная осесимметричная задача термоупругости для жестко закрепленной круглой пластины // *Инженерный журнал: наука и инновации*. 2018. № 5 (77). С. 1–15. doi: 10.18698/2308-6033-2018-5-1761
13. Шляхин Д.А., Даулетмуратова Ж.М. Нестационарная связанная осесимметричная задача термоупругости для жестко закрепленной круглой пластины // *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Механика*. 2019. № 4. С. 191–200. doi: 10.15593/perm.mech/2019.4.18
14. Лычев С.А. Связанная динамическая задача термоупругости для конечного цилиндра // *Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия*. 2003. № 4 (30). С. 112–124.
15. Лычев С.А., Манжиров А.В., Юбер С.В. Замкнутые решения краевых задач связанной термоупругости // *Известия Российской академии наук. Механика твердого тела*. 2010. № 4. С. 138–154.
16. Jabbari M., Sohrabpour S., Eslami M.R. General Solution for Mechanical and Thermal Stresses in a Functionally Graded Hollow Cylinder due to Nonaxisymmetric Steady-State Loads // *Journal of Applied Mechanics*. 2003. V. 70 (1). P. 111–118. doi: 10.1115/1.1509484
17. Protsiuk B., Syniuta V. Solution of the non-axisymmetric quasistatic thermoelasticity problem for multilayer cylinder with identical lame coefficients // *Scientific Journal of the Ternopil National Technical University*. 2018. V. 89 (1). P. 40–51. doi: 10.33108/visnyk_tntu2018.01.040
18. Tokovyy Yu.V., Chien-Ching Ma. Analysis of 2D non-axisymmetric elasticity and thermoelasticity problems for radially inhomogeneous hollow cylinders // *Journal of Engineering Mathematics*. 2008. V. 61. P. 171–184. doi: 10.1007/s10665-007-9154-6
19. Ковалев В.А., Радаев Ю.Н., Ревинский П.А. Прохождение обобщенной GNIII-термоупругой волны через волновод с проницаемой для тепла стенкой // *Известия Саратовского университета. Новая серия. Сер. Математика. Механика. Информатика*. 2011. Т. 11, № 1. С. 59–70.
20. Снеддон И.Н. Преобразования Фурье. М. : Изд-во иностр. лит., 1955.
21. Сеницкий Ю.Э. Многокомпонентное обобщенное конечное интегральное преобразование и его приложение к нестационарным задачам механики // *Известия вузов. Математика*. 1991. № 4. С. 57–63.
22. Сеницкий Ю.Э. Биортогональное многокомпонентное конечное интегральное преобразование и его приложение к краевым задачам механики // *Известия вузов. Математика*. 1996. № 8. С. 71–81.
23. Лычев С.А., Сеницкий Ю.Э. Несимметричные интегральные преобразования и их приложения к задачам вязкоупругости // *Вестник Самарского университета. Естественнонаучная серия*. 2002. Спец. вып. С. 16–38.

References

1. Podstrigach Ya.S., Lomakin V.A., Kolyano Yu.M. (1984) *Termouprugost' tel neodnorodnoy structurey* [Thermoelasticity of bodies of inhomogeneous structure]. Moscow: Nauka.
2. Nowacki W. (1975) *Dynamic Problems of Thermoelasticity*. Berlin: Springer.
3. Mindlin R.D. (1974) Equations of high frequency vibrations of thermopiezoelectric crystal plates. *International Journal of Solids and Structures*. 10(6). pp. 625–637. doi: 10.1016/0020-7683(74)90047-X

4. Lord H.W., Shulman Y. (1967) A generalized dynamical theory of thermoelasticity. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 15(5). pp. 299–309. doi: 10.1016/0022-5096(67)90024-5
5. Green A.E., Naghdi P.M. (1993) Thermoelasticity without energy dissipation. *Journal of Elasticity*. 31. pp. 189–208. doi: 10.1016/S0307-904X(02)00078-1
6. Kovalenko A.D. (1969) *Thermoelasticity: Basic Theory and Applications*. Groningen: Wolters-Noordhoff.
7. Sargsyan S.H. (2013) Mathematical model of micropolar thermo-elasticity of thin shells. *Journal of Thermal Stresses*. 36(11). pp. 1200–1216. doi: 10.1080/01495739.2013.819265
8. Verma K.L. (2008) Thermoelastic waves in anisotropic plates using normal mode expansion method. *World Academy of Science, Engineering and Technology*. 37. pp. 573–580. doi: 10.5281/zenodo.1058727
9. Zhornik A.I., Zhornik V.A., Savochka P.A. (2012) Ob odnoy zadache termouprugosti dlya sploshnogo tsilindra [On a thermoelasticity problem for a solid cylinder]. *Izvestiya Yuzhnogo federal'nogo universiteta. Tekhnicheskie nauki – Izvestiya SFedU. Engineering Sciences*. 9(1). pp. 63–69.
10. Harmatij H., Król M., Popovycz V. (2013) Quasi-static problem of thermoelasticity for thermosensitive infinite circular cylinder of complex heat exchange. *Advances in Pure Mathematics*. 3(4). pp. 430–437. doi: 10.4236/apm.2013.34061
11. Kovalev V.A., Radaev Yu.N., Semenov D.A. (2009) Svyazannye dinamicheskie zadachi giperbolicheskoy termouprugosti [Coupled dynamic problems of hyperbolic thermoelasticity]. *Izvestiya Saratovskogo universiteta. Seriya: Matematika. Mekhanika. Informatika – Izvestiya of Saratov University. Series: Mathematics. Mechanics. Informatics*. 4(2). pp. 94–127. doi: 10.18500/1816-9791-2009-9-4-2-94-127
12. Shlyakhin D.A., Dauletmuratova Gh.M. (2018) Nestatsionarnaya osesimmetrichnaya zadacha termouprugosti dlya zhestkozakreplennoy krugloy plastiny [Non-stationary axisymmetric thermoelasticity problem for a rigidly fixed round plate]. *Inzhenernyy zhurnal: nauka i innovatsii – Engineering Journal: Science and Innovation*. 5(77). pp. 1–15. doi: 10.18698/2308-6033-2018-5-1761
13. Shlyakhin D.A., Dauletmuratova Gh.M. (2019) Nestatsionarnaya svyazannaya osesimmetrichnaya zadacha termouprugosti dlya zhestko zakreplennoy krugloy plastiny [Non-stationary coupled axisymmetric thermoelasticity problem for a rigidly fixed round plate]. *Vestnik Permskogo natsional'nogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Mekhanika – PNRPU Mechanics Bulletin*. 4. pp. 191–200. doi: 10.15593/perm.mech/2019.4.18
14. Lychev S.A. (2003) Svyazannaya dinamicheskaya zadacha termouprugosti dlya konechnogo tsilindra [Coupled dynamic thermoelastic problem for a finite cylinder]. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya – Vestnik of Samara University. Natural Science Series*. 4(30). pp. 112–124.
15. Lychev S.A., Manzhirev A.V., Yuber S.V. (2010) Closed solutions of boundary-value problems of coupled thermoelasticity. *Mechanics of Solids*. 45(4). pp. 610–623. doi: 10.3103/S0025654410040102.
16. Jabbari M., Sohrabpour S., Eslami M.R. (2003) General solution for mechanical and thermal stresses in a functionally graded hollow cylinder due to nonaxisymmetric steady-state loads. *Journal of Applied Mechanics*. 70(1). pp. 111–118. doi: 10.1115/1.1509484
17. Protsiuk B., Syniuta V. (2018) Solution of the non-axisymmetric quasistatic thermoelasticity problem for multilayer cylinder with identical lame coefficients. *Scientific Journal of the Ternopil National Technical University*. 89(1). pp. 40–51. doi: 10.33108/visnyk_tntu2018.01.040
18. Tokovyy Yu.V., Ma Ch.-Ch. (2008) Analysis of 2D non-axisymmetric elasticity and thermoelasticity problems for radially inhomogeneous hollow cylinders. *Journal of Engineering Mathematics*. 61. pp. 171–184. doi: 10.1007/s10665-007-9154-6
19. Kovalev V.A., Radaev Yu.N., Revinskiy R.A. (2011) Prokhozhdenie obobshchennoy GNIII-termouprugoy volny cherez volnovod s pronitsaemoy dlya tepla stenkoy [Generalized cross-

- coupled type-III thermoelastic waves propagating via a waveguide under sidewall heat interchange]. *Izvestiya Saratovskogo universiteta. Seriya: Matematika. Mekhanika. Informatika – Izvestiya of Saratov University. Series: Mathematics. Mechanics. Informatics.* 1(11). pp. 59–70. doi: 10.18500/1816-9791-2011-11-1-59-70
20. Sneddon I.N. (1951) *Fourier Transforms*. New York: McGraw-Hill.
 21. Senitskiy Yu.E. (1991) Mnogokomponentnoe obobshchennoe konechnoe integral'noe preobrazovanie i ego prilozhenie k nestatsionarnym zadacham mekhaniki [A multicomponent generalized finite integral transformation and its application to nonstationary problems in mechanics]. *Izvestiya vuzov. Matematika – Russian Mathematics.* 4. pp. 57–63.
 22. Senitskiy Yu.E. (1996) Biortogonal'noe mnogokomponentnoe konechnoe integral'noe preobrazovanie i ego prilozhenie k kraevym zadacham mekhaniki [A biorthogonal multicomponent finite integral transformation and its application to boundary value problems in mechanics]. *Izvestiya vuzov. Matematika – Russian Mathematics.* 8. pp. 71–81.
 23. Lychev S.A., Senitskiy Yu.E. (2002) Nesimmetrichnye integral'nye preobrazovaniya i ikh prilozheniya k zadacham vyazkoupругosti [Nonsymmetric finite integral transformations and their application to visco-elasticity problems]. *Vestnik Samarskogo universiteta. Estestvennonauchnaya seriya – Vestnik of Samara University. Natural Science Series. Special Issue.* pp. 16–38.

Сведения об авторах:

Шляхин Дмитрий Аверкиевич – доктор технических наук, доцент, заведующий кафедрой «Строительная механика, инженерная геология, основания и фундаменты» Самарского государственного технического университета (Самара, Россия). E-mail: d-612-mit2009@yandex.ru

Юрин Владимир Андреевич – аспирант, инженер кафедры «Строительная механика, инженерная геология, основания и фундаменты» Самарского государственного технического университета (Самара, Россия). E-mail: get8ack@mail.ru

Ратманова Олеся Викторовна – кандидат технических наук, доцент кафедры «Строительная механика, инженерная геология, основания и фундаменты» Самарского государственного технического университета (Самара, Россия). E-mail: ratmanova654@mail.ru

Information about the authors:

Shlyakhin Dmitriy A. (Doctor of Technical Sciences, Samara State Technical University, Samara, Russian Federation). E-mail: d-612-mit2009@yandex.ru

Yurin Vladimir A. (Samara State Technical University, Samara, Russian Federation). E-mail: get8ack@mail.ru

Ratmanova Olesya V. (Candidate of Technical Sciences, Samara State Technical University, Samara, Russian Federation). E-mail: ratmanova654@mail.ru

Статья поступила в редакцию 17.05.2023; принята к публикации 05.08.2024

The article was submitted 17.05.2023; accepted for publication 05.08.2024

Научный журнал

**ВЕСТНИК
ТОМСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА.
МАТЕМАТИКА И МЕХАНИКА**

Tomsk State University Journal of Mathematics and Mechanics

2024. № 90

Редактор Е.Г. Шумская
Оригинал-макет Е.Г. Шумской
Дизайн обложки Л.Д. Кривцова

Подписано в печать 23.08.2024 г. Формат 70×100¹/₁₆.
Печ. л. 10,5; усл. печ. л. 9,8. Цена свободная.
Тираж 250 экз. Заказ № 5999.

Дата выхода в свет 27.08.2024 г.

Адрес издателя и редакции: 634050, г. Томск, пр. Ленина, 36
Томский государственный университет

Журнал отпечатан на полиграфическом оборудовании
Издательства Томского государственного университета
634050, г. Томск, Ленина, 36
Тел. 8(382-2)–52-98-49; 8(382-2)–52-96-75
Сайт: <http://publish.tsu.ru>; E-mail: rio.tsu@mail.ru