

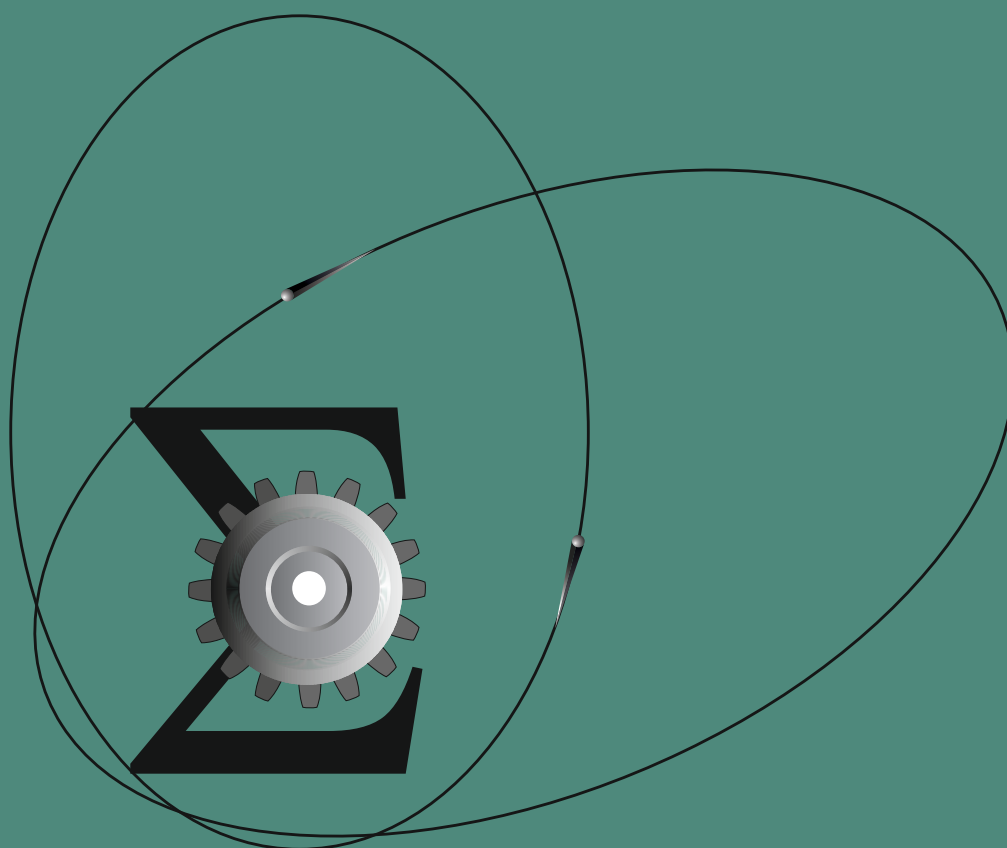
ISSN 2949-6284

СИБИРСКИЙ ЖУРНАЛ ИНДУСТРИАЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ

ТОМ 27

№ 1

2024



НОВОСИБИРСК
ИЗДАТЕЛЬСТВО ИНСТИТУТА МАТЕМАТИКИ

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор	В. Л. Береснев
Зам. главного редактора	М. А. Шишленин
Отв. секретарь	В. А. Дедок

ЧЛЕНЫ РЕДКОЛЛЕГИИ

Г. В. Алексеев	С. Б. Медведев
Б. Д. Аннин	Р. Г. Новиков
В. С. Белоносов	Д. Е. Пальчунов
В. Н. Белых	И. Б. Петров
Ю. С. Волков	П. И. Плотников
К. В. Воронцов	М. И. Протасов
А. В. Гасников	В. Г. Романов
М. А. Гузеев	Е. М. Рудой
В. П. Ильин	К. К. Сабельфельд
С. И. Кабанихин	В. М. Садовский
А. Н. Карапетянц	Д. Н. Сидоров
А. Л. Карчевский	А. С. Терсенов
М. В. Клибанов	В. С. Тимофеев
С. С. Кутателадзе	В. В. Шайдуров
В. А. Левин	А. А. Шананин
Н. И. Макаренко	

Учредители журнала:

Сибирское отделение РАН

Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН

Переводы статей на английский язык публикуются с 2007 г.
в журнале Journal of Applied and Industrial Mathematics.

Журнал включен в базу Russian Science Citation Index (RSCI)
на платформе Web of Science.

СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК

ИНСТИТУТ МАТЕМАТИКИ им. С. Л. СОБОЛЕВА

СИБИРСКИЙ ЖУРНАЛ ИНДУСТРИАЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ

Основан в 1998 году

Выходит 4 раза в год

Том 27, № 1(97)

Научный журнал

Январь–март, 2024 г.

СОДЕРЖАНИЕ

Бибердорф Э. А., Митенкова Е. Ф., Семёнова Т. В. О спектральной проблеме в задаче моделирования распределения нейтронов в слабосвязных системах	5
Гребенев В. Н., А. Г. Деменков, Г. Г. Черных Локально-равновесное приближение в задаче о динамике плоского турбулентного следа в пассивно стратифицированной среде	16
Куликов И. М. Использование кусочно-параболической реконструкции физических переменных в схеме Русанова. II. Уравнения специальной релятивистской магнитной гидродинамики	29
Лазарева Г. Г., Попов В. А., Окишев В. А. Математическая модель динамики распределения тока электронного пучка в вольфрамовой пластинке и тонком слое его паров при импульсном нагреве с учётом электродвижущей силы	43
Мороз Л. И., Масловская А. Г. Дробно-дифференциальный подход для численного моделирования электронно-индуцированной зарядки сегнетоэлектриков	55
Хмелёв В. Н., Шалунов А. В., Голых Р. Н. Метод расчёта ультразвуковой коагуляции частиц размером менее 2.5 мкм в трёхмерных вихревых и турбулентных акустических течениях	72
Чумаков Г. А., Чумакова Н. А. Дифференциальные уравнения с малым параметром и многопиковые автоколебания	87
Шилов Н. Н., Дучков А. А. Миграционный скоростной анализ по лучевой асимптотике уравнения двойного корня	108

НОВОСИБИРСК

ИЗДАТЕЛЬСТВО ИНСТИТУТА МАТЕМАТИКИ

Журнал публикует оригинальные работы и обзоры по актуальным проблемам прикладной и индустриальной математики. Тематика журнала охватывает следующие разделы:

- математическое моделирование;
- анализ данных;
- искусственный интеллект;
- развитие и анализ вычислительных алгоритмов;
- теория управления;
- математическая экономика;
- дифференциальные уравнения;
- прикладной гармонический анализ в механике, физике, технике и технологии, химии, биологии, экологии, медицине и т. д.

АДРЕС РЕДАКЦИИ:

СибЖИМ

Институт математики

им. С. Л. Соболева СО РАН

просп. Акад. Коптюга, 4

Новосибирск 630090, Россия

Телефон: +7 (383) 329-76-11

E-mail: sibjim-edit@math.nsc.ru

SIBERIAN BRANCH OF THE RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES

SOBOLEV INSTITUTE OF MATHEMATICS

SIBIRSKII ZHURNAL INDUSTRIAL'NOI MATEMATIKI

Published since 1998

4 issues per year

Vol. 27, No. 1(97)

Scientific journal

January–March, 2024

CONTENTS

Biberdorf E. A., Mitenkova E. F., Semenova T. V. On the spectral problem of modeling neutron distribution in weakly coupled systems.....	5
Grebennev V. N., Demenkov A. G., Chernykh G. G. Local equilibrium approach in the problem of the dynamics of a plane turbulent wake in a passively stratified medium ..	16
Kulikov I. M. Using piecewise parabolic reconstruction of physical variables in Rusanov's solver. II. Special relativistic magnetohydrodynamics equations.....	29
Lazareva G. G., Popov V. A., Okishev V. A. Mathematical model of current distribution in a tungsten plate during pulsed heating	43
Moroz L. I., Maslovskaya A. G. A fractional-differential approach to numerical simulation of electron-induced charging of ferroelectrics.....	55
Khmelev V. N., Shalunov A. V., Golykh R. N. A method for calculating ultrasonic coagulation of pm2.5 particles in vortex and turbulent acoustic flows	72
Chumakov G. A., Chumakova N. A. Differential equations with a small parameter and multipeak oscillations	87
Shilov N. N., Duchkov A. A. Migration velocity analysis using a ray method asymptotics of the double square root equation	108

NOVOSIBIRSK
SOBOLEV INSTITUTE PRESS

The journal publishes the original papers and surveys of the topical problems of applied and industrial mathematics. The covered areas include:

- mathematical modeling;
- data analysis;
- artificial intelligence;
- development and analysis of computational algorithms;
- control theory;
- mathematical economics;
- differential equations;
- applied harmonic analysis in mechanics, physics, engineering, chemistry, biology, ecology, medicine, etc.

EDITORIAL OFFICE ADDRESS:

SibJIM

Sobolev Institute of Mathematics SB RAS

pr. Akad. Koptiyuga 4

Novosibirsk 630090, Russia

Phone: +7 (383) 329-76-11

E-mail: sibjim-edit@math.nsc.ru

УДК 519.677

О СПЕКТРАЛЬНОЙ ПРОБЛЕМЕ В ЗАДАЧЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ
РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НЕЙТРОНОВ В СЛАБОСВЯЗНЫХ СИСТЕМАХ© 2024 Э. А. Бибердорф^{1а}, Е. Ф. Митенкова^{2б}, Т. В. Семёнова^{3с}¹*Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН,
просп. Акад. Коптюга, 4, г. Новосибирск 630090, Россия,*²*Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН,
ул. Большая Тульская, 52, г. Москва 115191, Россия,*³*Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский
научно-исследовательский институт экспериментальной физики,
просп. Мира, 37, г. Саров 607188, Россия*E-mails: ^аmath@biberdorf.ru, ^бmit@ibrae.ac.ru, ^сTVSemenova@vniief.ruПоступила в редакцию 25.08.2023 г.; после доработки 25.08.2023 г.;
принята к публикации 20.02.2024 г.

В работе рассматривается спектральная задача, связанная с исследованием локальных характеристик слабосвязанных систем в физике реакторов. Описывается метод ассоциированных инвариантных подпространств, основанный на методе дихотомии матричного спектра, с помощью которого находятся распределения, отражающие размножающие свойства локальных областей системы.

Ключевые слова: спектр, инвариантные подпространства, слабосвязные системы, матрица делений.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.101

ВВЕДЕНИЕ

Базовой задачей физики реакторов является задача на критичность с вычислением главной интегральной характеристики реакторной системы — эффективного коэффициента размножения нейтронов K_{eff} . Её решение основывается на моделировании прохождения нейтронов в сложных гетерогенных средах, которое наиболее полно реализуется с помощью статистических алгоритмов Монте-Карло. В современных отечественных и зарубежных кодах, базирующихся на использовании алгоритмов Монте-Карло (прецизионные коды), для решения задач на критичность используется итерационный метод поколений, обеспечивающий в реакторных системах надёжное вычисление K_{eff} с высокой точностью [1]. Сходимость итераций определяется отношением двух наибольших модулей собственных значений или доминантным отношением матрицы делений (см. подробнее раздел 1, а также [2]). В системах, матрица деления которых имеет доминантное отношение близкое к единице, при вычислении нейтронных потоков и связанных с ними функционалов (скорость деления, поглощения и др.) возникают проблемы, обусловленные алгоритмическими особенностями метода поколений и выбором расчётных (статистических) параметров. Это приводит к значительным погрешностям вычисляемых распределений нейтронов и даже к некорректным результатам [3, 4]. Заметим, что доминантное отношение, близкое к единице, могут иметь системы с разной геометрией и степенью гетерогенности [5].

В настоящей работе рассматривается задача распределения нейтронов в слабосвязных системах. К подобным системам можно отнести системы с протяжёнными неоднородными

топливными областями, размеры которых превышают длину свободного пробега нейтронов в десятки раз (40–80 см), а соседние области характеризуются заметно различающимися нейтронно-физическими характеристиками захвата нейтронов и деления (состав и обогащение топливных композиций). К слабосвязным системам, в частности, относится классическая система твэл, включая и твэл с отработавшим топливом [6].

Впервые проблема переноса нейтронов в слабосвязных системах нашла отражение в работе Г. Уайтсайда в 1971 году [7], где анализировалась задача расчёта эффективного коэффициента размножения нейтронов K_{eff} . Дело в том, что задача распределения нейтронов для слабосвязных систем не может быть решена традиционными методами, применяемыми для реакторных задач [8, 9], а понятие эффективного коэффициента размножения нейтронов теряет смысл. Однако можно рассмотреть его возможные аналоги, характеризующие локальные свойства отдельных областей рассматриваемой системы и связанные с этими областями распределения нейтронов. Для рассматриваемой системы, заданной с разным уровнем пространственной детализации, должны быть выработаны критерии, позволяющие сопоставлять получаемые распределения, сравнивать значимость подобластей, устанавливать их вклад в общее распределение и т. д.

Представленный в данной работе метод ассоциированных инвариантных подпространств (АИП) пока во многом имеет эмпирический характер и требует дальнейшего теоретического изучения и обоснования, причём как с физической так и с математической точек зрения. Для этого, в частности, необходимо более точное определение множества матриц, к которому относится матрица деления, а также выработка численных критериев, определяющих качество найденных распределений.

В основе метода АИП лежит дихотомии матричного спектра [10]. Этот подход позволяет избежать сложностей, связанных с наличием собственных значений близких к кратным или комплексно сопряжённых (так как речь идёт о распределениях нейтронов, важно оставаться в вещественном пространстве).

1. МАТРИЦА ДЕЛЕНИЯ

Рассмотрим слабосвязную систему “твэл”, которая представляет собой стержень длиной $l = 360$ см и диаметром 0.95 см, состоящий из нескольких топливных зон разного обогащения, окружённый водой. Мы будем представлять твэл в виде интервала $I = [0, l]$, который разделим на n подинтервалов (ячеек) $I_j = [(j-1)l/n, jl/n]$, пронумерованных от 1 до n . Каждой ячейке сопоставим значение w_j — коэффициент, соответствующий проценту обогащения соответствующей топливной зоны.

В программе TDMCC [11] вычисление распределения нейтронов в слабосвязных системах базируется на матрице деления A . Кратко опишем принципы формирования этой матрицы в программе TDMCC. Каждый элемент матрицы A_{ij} определяется как число делений в ячейке I_j от нейтронов, стартовавших из ячейки I_i , нормированное на число s_i^0 стартовых нейтронов в i -й ячейке. При этом все элементы траекторий каждого нейтрона вычисляются методом Монте-Карло.

Замечание 1. Суммы

$$b_i = \sum_{j=1}^n A_{ij} \text{ и } c_j = \sum_{i=1}^n A_{ij} \quad (1)$$

можно трактовать как общее число нейтронов, вылетевших из i -й ячейки, и общее число делений в j -й области. Очевидно, что вектор $b = (b_1, \dots, b_n)^T$ есть сумма столбцов матрицы A , в то время как $c = (c_1, \dots, c_n)^T$ — сумма столбцов матрицы A^T .

Матрица A обладает рядом специфических свойств. Прежде всего она несимметрична. Все её элементы положительны, а при удалении от главной диагонали они уменьшаются вплоть

до нуля. Количество ненулевых диагоналей зависит от статистики: от общего числа стартовых нейтронов и от числа поколений, то есть от общего числа циклов от одного события (столкновения, деления, поглощения и т. д.) до другого. Элементы матрицы также существенно зависят от выбранного разбиения области. Кроме того, специфика статистических методов делает чувствительными к статистике значения ячеек A_{ij} из ближайшего окружения ячейки i .

По определению (см. [12], стр. 352) матрица A является неразложимой (так как ни один из элементов $A_{i,i+1}$ и $A_{i+1,i}$ не равен нулю), а следовательно по теореме Перрона—Фробениуса её максимальное по модулю собственное значение $\lambda_{\max}$ положительно, ему соответствует одномерное инвариантное подпространство, причём компоненты собственного вектора v могут быть выбраны все положительные. Эти свойства используются при определении коэффициента размножения $K_{eff} = \lambda_{\max}$ твэла и распределённого источника нейтронов, описываемого собственным вектором v .

2. ОСОБЕННОСТИ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ СЛАБОСВЯЗНЫХ СИСТЕМ

Применение описанного выше подхода к слабосвязным системам может приводить к некорректным результатам. В работе [11] была рассмотрена ситуация, когда распределение w_j симметрично относительно середины интервала, а зоны с повышенным обогащением удалены друг от друга так, что нейтрон, стартующий из одной области, не попадает в другую. Симметрия топливных зон должна породить симметричный источник нейтронов. Однако, в результате вычислений итоговый источник нейтронов получался парадоксальным образом несимметричным, причём увеличение статистики только усиливало асимметрию.

Этот кажущийся парадокс легко объясняется с точки зрения линейной алгебры. Оказывается, в данном случае старшее собственное значение близко к кратному, из-за чего и возникает вычислительная неустойчивость.

Этот и другие примеры говорят о том, что в случае слабосвязанных систем необходимо перейти от определения единого источника нейтронов к выделению нескольких локальных источников, связанных с отдельными топливными зонами. Это означает, что кроме старшего собственного значения и его собственного вектора нужно рассмотреть и другие собственные значения и инвариантные подпространства.

Ниже мы представим подход к решению этой проблемы, который получил название метод ассоциированных инвариантных подпространств (АИП) и был впервые представлен в работе [13]. Данный метод позволяет выделять инвариантные подпространства матрицы A , связанные с определёнными топливными зонами. В них выделяются векторы, описывающие соответствующие распределения нейтронов, которые можно интерпретировать как источники, привязанные к конкретным топливным зонам. При этом некоторый коэффициент, представляющий собой отношение собственных значений матрицы A , играет роль локального коэффициента размножения.

3. МЕТОД АССОЦИИРОВАННЫХ ИНВАРИАНТНЫХ ПОДПРОСТРАНСТВ

3.1. Спектральный портрет и инвариантные подпространства

Первым шагом метода является разделение пространства R^n на инвариантные подпространства матрицы A :

$$R^n = L_1 \oplus L_2 \oplus \dots \oplus L_k.$$

С этой целью мы строим одномерный спектральный портрет [14]. Он представляет собой график функции $\omega(r) = \|H(r)\|$ для некоторого параметризованного семейства кривых $\gamma(r)$, где матрица $H(r)$ имеет вид

$$H(r) = \oint_{\gamma(r)} (\bar{\lambda}I - A^*)(\lambda I - A^*)|d\lambda|$$

(I — единичная матрица), возможно, с некоторой матричной или скалярной нормировкой. В случае, когда A — описанная выше матрица делений, в качестве семейства $\gamma(r)$ могут быть взяты окружности с центром в нуле радиуса r (см. рис. 2).

Если значение $\omega(r)$ конечно, то кривая $\gamma(r)$ делит спектр матрицы на две части, каждой из которых соответствует инвариантное подпространство, натянутое на собственные векторы. Важно заметить, что одновременно с вычислением $H(r)$ происходит вычисление проекторов $P(r)$ и $I - P(r)$ на инвариантные подпространства матрицы A , соответствующие собственным значениям, лежащим по разные стороны кривой. Анализируя таким образом спектральный портрет, мы разделяем спектр матрицы A на подмножества, которые группируются в окрестностях окружностей $\gamma(r_i)$, то есть для которых выполняется приблизительное равенство $|\lambda| \approx r_i$, и вычисляем соответствующие базисы инвариантных подпространств. Для этого используется сингулярное разложение проекторов P_i [10], стр. 205:

$$P_i = [U_i:W_i] \begin{bmatrix} \Sigma_i & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V_i,$$

где матрица U_i состоит из ортонормированных базисных векторов соответствующего инвариантного подпространства L_i . Заметим, что если инвариантное подпространство имеет размерность 1, т. е. соответствует единственному собственному значению, то его базис совпадает с собственным вектором.

3.2. Выбор ассоциированных подпространств

Рассмотрим векторы, состоящие из нулей и единиц, которые описывают положение топливных зон системы. Например, вектор

$$u = (0; 0; 1; 1; 1; 1; 0; 0; 0; 0; 0; 0; 0; 0; 0; 0; 0; 0)^T$$

при длине системы 360 см и разбиении на $n = 18$ ячеек указывает на зону длиной 80 см, находящуюся в 40 см от левого края системы. При этом квадрат евклидовой нормы $\|u\|^2$ равен числу ячеек системы, составляющих заданную зону (для данного примера $\|u\|^2 = 4$). Такие векторы будем называть векторами-индикаторами.

Определение. Инвариантное подпространство L_i матрицы деления A называется ассоциированным с заданной зоной системы, если вектор-индикатор зоны образует с этим подпространством наименьший угол.

Угол между вектором u и подпространством L_i будем находить по формуле

$$|\cos \alpha| = \|u^* U_i\|,$$

так как

$$|\cos \alpha| = \max_{\|a\|=1} |(U_i a, u)| = \max_{\|a\|=1} |u^* U_i a| = \|u^* U_i\|,$$

где $(\cdot, \cdot)$, $\|\cdot\|$ — скалярное произведение и евклидова норма соответственно.

Заметим, что ассоциированное подпространство можно расширять за счёт объединения с другими инвариантными подпространствами.

3.3. Проекция и нормировки

После того, как для определённой зоны системы выбрано ассоциированное подпространство L_i , соответствующее собственным значениям таким, что $|\lambda| \approx r_i$, нужно вычислить проекцию вектора-индикатора u на это подпространство:

$$v = P_i u.$$

Полученную проекцию, вообще говоря, можно нормировать произвольным образом. Пусть вектор ρ представляет распределение некоторой величины по длине системы, которое мы будем считать в каком-то смысле эталонным. Первый вариант нормировки можно использовать в случае, если у этого распределения, а также у самих проекций вариации значений не слишком велики. В этом случае вычисляются максимальные значения

$$v_{\max} = \max v_j, \quad \rho_{\max} = \max \rho_j.$$

Далее проекция v нормируется следующим образом:

$$\mathbf{v} = \frac{\rho_{\max}}{v_{\max}} \frac{r_i}{r_{\max}} v. \quad (2)$$

В случае, когда на графиках ρ и/или v есть резкие перепады и пики, то в нормировке нужно использовать не максимальные, а усреднённые значения. Заметим, что величины

$$\rho_{\text{mid}} = (\rho, u) / \|u\|^2, \quad v_{\text{mid}} = (v, u) / \|u\|^2$$

представляют собой средние арифметические значения распределения ρ и проекции v в зоне, заданной вектором-индикатором u . Нормированная проекция в этом случае имеет вид

$$\mathbf{v} = \frac{\rho_{\text{mid}}}{v_{\text{mid}}} \frac{r_i}{r_{\max}} v. \quad (3)$$

Чем отличаются эти нормировки будет показано на примере в следующем разделе.

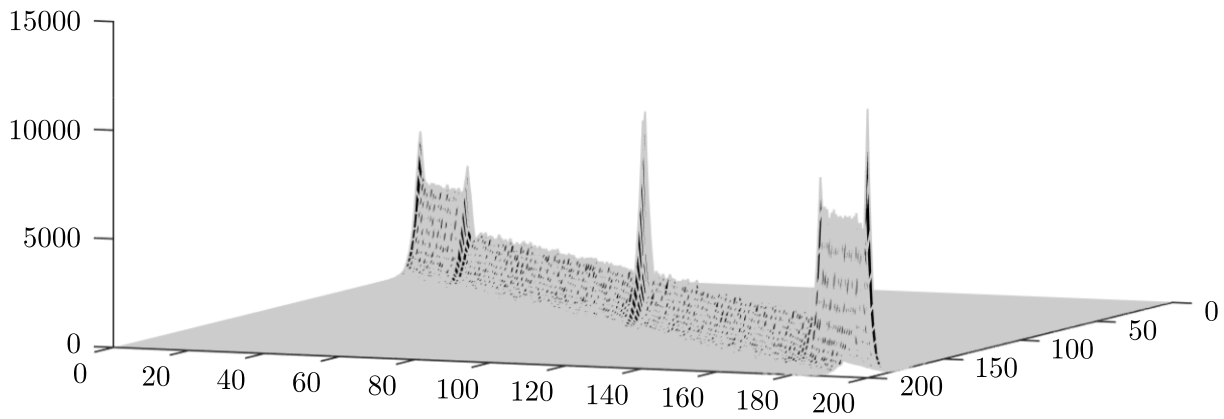
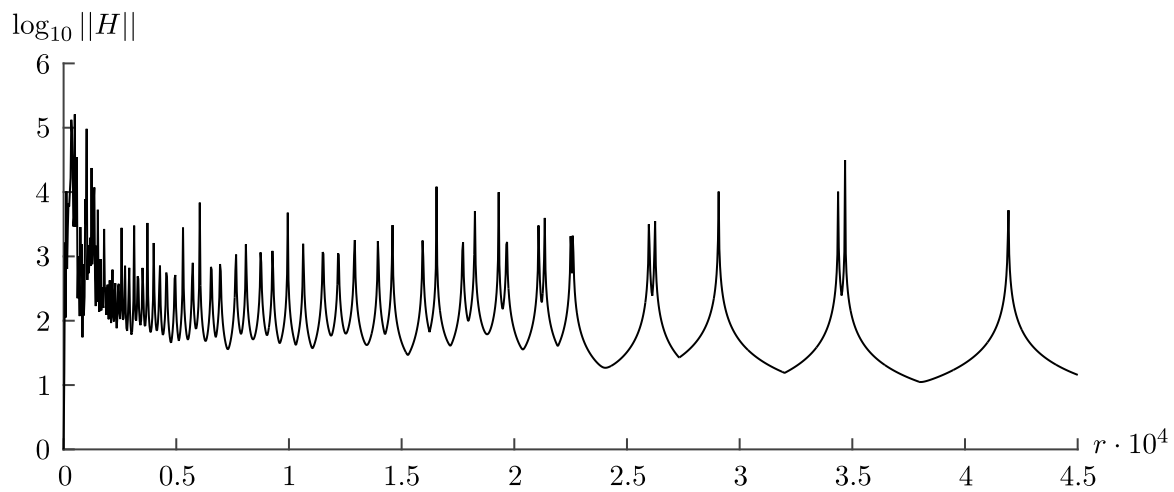
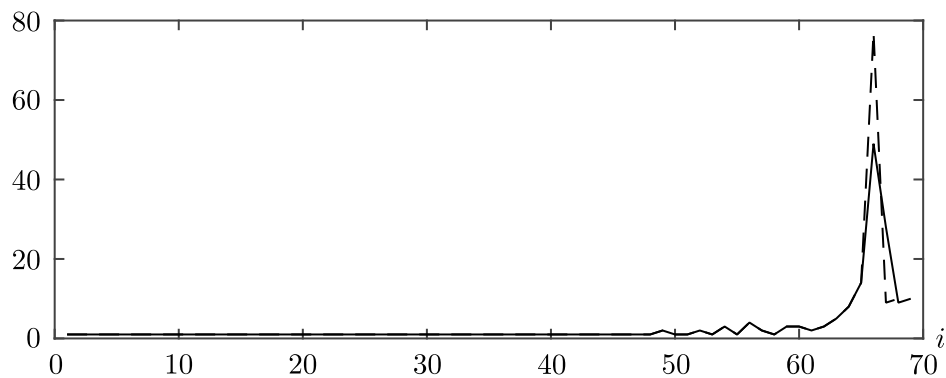
4. ПРИМЕР

Рассмотрим слабосвязную систему длиной 360 см, состоящую из топливных зон разного обогащения — две краевые зоны длиной по 40 см с обогащением 4.5 и 90%, соответственно, центральная область длиной 1 см обогащением 45%, остальные области обогащением 0,7%. Применим метод АИП к матрице деления A размера 200×200 , описывающую данную систему и сгенерированную с помощью программы TDMCC (данную матрицу можно скачать по ссылке <https://cloud.mail.ru/public/sBSK/VhMNNK8eg>). Структуру матрицы можно увидеть на рис. 1. Для матрицы A строим одномерный радиальный спектральный портрет (рис. 2) и в соответствии с ним находим базисы инвариантных подпространств U_i , которые мы пронумеруем от старшего собственного значения к младшему. График зависимости размерности подпространства от его номера изображён на рис. 3.

Введём векторы индикаторы для областей с повышенным коэффициентом обогащения. Для этого рассмотрим векторы i_{30} , i_{22} , i_3 , состоящие из 30-и, 22-х и 3-х единиц, а также векторы, состоящие из нулей, z_{178} , z_{170} , z_{99} , z_{98} , z_{89} . Из них составим набор векторов-индикаторов. Для краевых областей это будут $e = (i_{30}, z_{170})^T$, $f = (z_{170}, i_{30})^T$ (индикаторы левой и правой краевых областей). А для узкой центральной области рассмотрим два индикатора: $g = (z_{89}, i_{22}, z_{89})^T$ и $h = (z_{99}, i_3, z_{98})^T$. Заметим, что первый из них является индикатором значительно более широкой области.

Для этих векторов-индикаторов вычисляем углы с полученными ранее инвариантными подпространствами. Графики значений этих углов в зависимости от номера подпространства можно видеть на рис. 4.

Отметим, что на графике углов для каждого вектора выделяется одно подпространство. Для векторов g и h это одно и то же подпространство, при этом у вектора g угол с ним меньше, чем у h . Это может показаться парадоксальным ввиду малых размеров серединной топливной зоны. Однако можно предположить, что размеры области влияния топливной зоны несколько шире её собственной длины и поэтому для поиска связанного с ней источника нужно выбирать индикаторы более широких областей. Опираясь на это предположение, далее мы используем только вектор g .

Рис. 1. Изображение значений A_{ij} в зависимости от номеров i, j Рис. 2. Одномерный радиальный спектральный портрет матрицы A Рис. 3. Зависимости размерности подпространства от его номера, для матрицы A — сплошная, для A^T — прерывистая линии

Замечание 2. Найденные подпространства, ассоциированные с краевыми и центральной топливными областями, являются одномерными, проекции векторов-индикаторов совпадают с собственными векторами.

В качестве эталонного распределения выберем в данном случае вектор b (формула (1)). Для нормировки используем первый способ (см. (2)). Полученные проекции обозначим e, f, g . Их сравнение с эталонным распределением приведено на рис. 5. На рисунке видно, что в

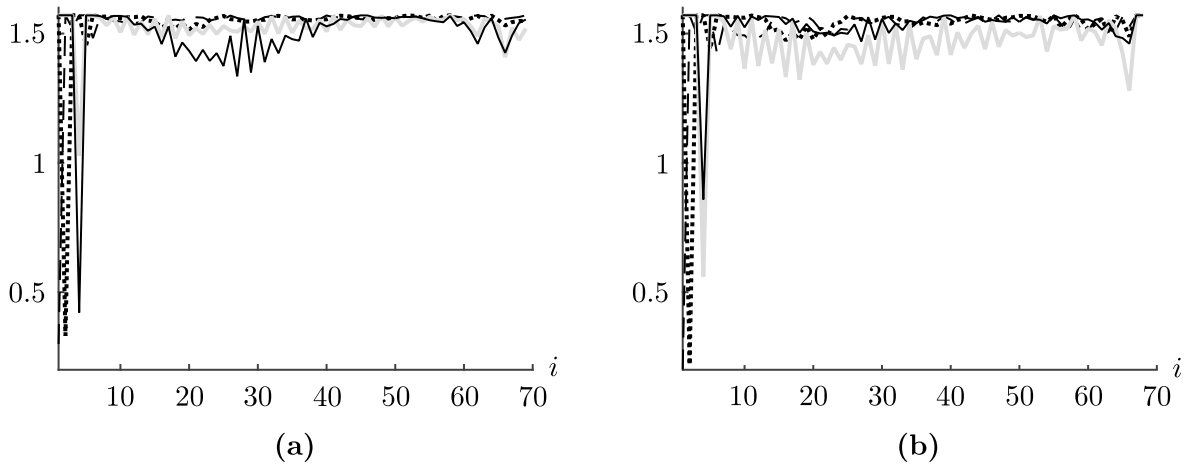


Рис. 4. Графики значений углов между векторами-индикаторами e (пунктир), f (штрих), g (чёрная сплошная), h (серая сплошная) и инвариантными подпространствами в зависимости от их номеров для (a) матрицы A и (b) матрицы A^T

окрестностях выбранных топливных областей полученные распределения с некоторой точностью повторяют контуры выбранного эталонного распределения. Причём это касается и распределения, ассоциированного с узкой центральной областью. При удалении от соответствующей топливной области компоненты найденных векторов стремятся к нулю. Это соответствует тому факту, что с увеличением расстояния влияние источника уменьшается.

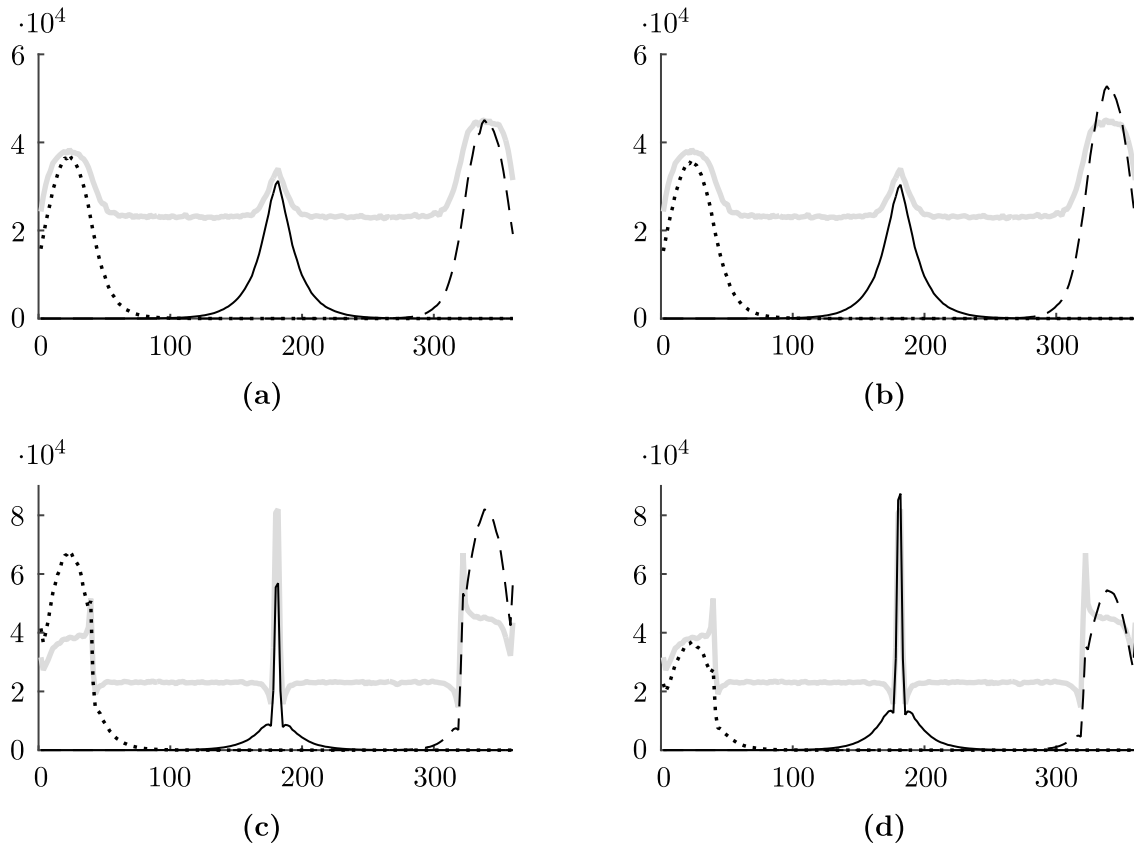


Рис. 5. Проекции e (пунктир), f (штрих), g (чёрная сплошная) с первой (a), (c) и второй (b), (d) нормировкой в сравнении с эталонными распределениями (серая сплошная) для матрицы A (a), (b) и для матрицы A^T (c), (d)

Применим аналогичный подход к матрице A^T . В данном случае ассоциированное подпространство ближе к вектору h , чем к g . Однако, как оказалось, в данном случае вектор g даёт более точную нормировку (усреднение по более широкой области). Поэтому и в этой части мы также используем вектор g .

Построим проекции векторов-индикаторов e, f, g на ассоциированные с ними инвариантные подпространства. В качестве эталонного распределения берём вектор c . В данном случае и проекции и эталонное распределение имеют резкие перепады и пики, поэтому для нормировки используем формулы (3). И в этом случае нормированные проекции близки к вектору c в окрестностях соответствующих топливных зон (см. рис. 5).

5. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Полученные при применении метода АИП проекции обладают несколькими важными свойствами. Во-первых, их компоненты положительны. Во-вторых, максимальных значений компоненты достигают в тех областях, с которыми они ассоциированы, и уменьшаются до нуля при удалении от них. В-третьих, выбранные нормировки позволяют получить величины компонент проекций пропорциональные коэффициенту обогащения w ассоциированной области. Эти свойства позволяют трактовать результирующие векторы e, f, g как некоторые распределения, описывающие свойства источника, связанного с конкретной топливной зоной. При этом нормировочные множители

$$b_{\max} \frac{r_i}{r_{\max}}, \quad c_{\text{mid}} \frac{r_i}{r_{\max}}$$

(см. (2), (3)) отражают локальные размножающие свойства этих источников.

Отметим также тот факт, что нам удаётся получить два набора проекций: описывающих число вылетевших нейтронов и описывающих общее число делений. Таким образом, процесс может быть исследован в двух планах. Также важно отметить, что метод АИП достаточно чувствителен и позволяет выделить источники, связанные с весьма узкими топливными областями.

Тем не менее, как уже говорилось, остаётся много открытых вопросов, в частности, с формальным математическим описанием множества матриц деления, к которым применим этот подход. Другой вопрос состоит в создании критерия, с помощью которого можно было бы оценивать качество полученных распределений. Этот вопрос в свою очередь связан с проблемой разделения вкладов статистической погрешности и собственно вычислительных погрешностей в итоговый результат.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Слабосвязные системы представляют отдельный класс задач физики реакторов, требующих особого подхода к нейтронно-физическим расчётам, в частности, к формированию матрицы деления. Для слабосвязных систем спектральная задача в классической постановке не обеспечивает достоверные распределения нейтронов. Метод ассоциированных инвариантных подпространств позволяет в слабосвязных системах, в том числе, в системах с локальными (чётко выделенными) областями размером меньше длины свободного пробега нейтрона получать адекватные распределения, удовлетворяющие некоторым прогностическим оценкам характеристик соответствующих локальных зон. Применимость метода АИП для систем с более сложной пространственно-материальной структурой связана с выработкой критериев к допустимому виду (множеству) формируемых матриц деления. При этом следует учитывать, что матрицы деления, представляющие рассматриваемые системы недостаточно детально, могут приводить к не совсем корректным распределениям, и в то же время детализация обуславливает увеличение размерности формируемых матриц и статистической погрешности её элементов.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках государственных заданий Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН (проект FWNF-2022-0008) и Института проблем безопасного развития атомной энергетики РАН (проект FFGZ-2019-0005). Других источников финансирования проведения или руководства данным конкретным исследованием не было.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Соболев И. М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука, 1973.
2. Brown F. B., Carney S. E., Kiedrowski B. C., Martin W. R. Fission Matrix Capability for MCNP, Part I — Theory // Proc. Int. Conf. Math. Comput. Methods Appl. Nucl. Sci. Eng. 2013. P. 2828–2839.
3. Brissenden R. J., Garlick A. J. Biases in the estimation of K_{eff} and its error by Monte-Carlo Methods // Ann. Nucl. Energy. 1986. V. 13. P. 63–83.
4. Ueki T., Brown F. B., Parsons D. K., Kornreich D. E. Autocorrelation and dominance ratio in Monte-Carlo criticality calculations // Nucl. Sci. Eng. 2003. V. 145. P. 279–290.
5. Митенкова Е. Ф., Семёнова Т. В. Использование программы TDMCC для решения задач с доминантным отношением близким к единице // Вопросы атомной науки и техники, сер. матем. моделир. физ. процессов. 2015. № 4. С. 3–13.
6. Blomquist R. N., Amirshaw M., Hanlon D., Smith N., Naito Yo., Yang J., Mioshi Yo., Yamamoto T., Jacquet O., Miss J. Source Convergence in Criticality Safety Analysis, Phase I: Results of Four Test Problems. Paris: OECD/NEA, 2006.
7. Whitesides G. E. A difficulty in computing the k-effective of the World // Transactions of the American Nuclear Society. 1971. V. 14, N 2. P. 26–40.
8. Митенкова Е. Ф., Колташев Д. А., Кизуб П. А. Распределение скорости реакции деления в слабосвязанной системе для тестовой модели “шахматная доска” // Атомная энергия. 2014. Т. 116, № 6. С. 345–350.
9. Митенкова Е. Ф., Семёнова Т. В. Счёт функций распределения нейтронов в плоских системах с протяжёнными неоднородными топливными областями // Атомная энергия. 2019. Т. 126, № 1. С. 15–19.
10. Годунов С. К. Современные аспекты линейной алгебры. Новосибирск: Научная книга, 1997.
11. Семёнова Т. В., Митенкова Е. Ф., Соловьёва Е. В. Матрица деления в программе TDMCC для расчёта слабосвязанных систем // Вопросы атомной науки и техники, сер. ядерно-реакторные константы. 2019. № 2. С. 31–35.
12. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц. М.: Физматлит, 2004.
13. Бибердорф Э. А., Митенкова Е. Ф., Семёнова Т. В., Соловьёва Е. В. Метод ассоциированных инвариантных подпространств в задачах распределения нейтронов в слабосвязных системах // Вопросы атомной науки и техники, сер. матем. моделир. физ. процессов. 2022. № 2. С. 3–16.
14. Буньков В. Г., Годунов С. К., Курзин В. Б., Садкане М. Применение нового математического аппарата “Одномерные спектральные портреты матрицы” к решению проблемы аэроупругих колебаний решёток лопастей // Учёные записки ЦАГИ. 2009. Т. 40, № 6. С. 3–13.

UDC 519.677

ON THE SPECTRAL PROBLEM OF MODELING NEUTRON DISTRIBUTION IN WEAKLY COUPLED SYSTEMS

© 2024 E. A. Biberdorf^{1a}, E. F. Mitenkova^{2b}, T. V. Semenova^{3c}

¹*Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences,
Novosibirsk, 630090 Russia,*

²*Nuclear Safety Institute, Russian Academy of Sciences, Moscow, 115191 Russia,*

³*Russian Federal Nuclear Center — All-Russian Research Institute of Experimental
Physics,
Sarov, Nizhny Novgorod oblast, 607188 Russia*

E-mails: ^amath@biberdorf.ru, ^bmit@ibrae.ac.ru, ^cTVSemenova@vniief.ru

Received 25.08.2023, revised 25.08.2023, accepted 20.02.2024

Abstract. The paper considers the spectral problem to study of local characteristics of weakly coupled systems in reactor physics. The method of associated invariant subspaces based on the matrix spectrum dichotomy method is described. When using this method, the neutron distributions are found that reflect the multiplying properties of system local areas.

Keywords: spectrum, invariant subspace, weakly coupled system, fission matrix.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.101

REFERENCES

1. I. M. Sobol', *Numerical Monte Carlo Methods* (Nauka, Moscow, 1973) [in Russian].
2. F. B. Brown, S. E. Carney, B. C. Kiedrowski, and W. R. Martin, "Fission matrix capability for MCNP, Part I — Theory," *Proc. Int. Conf. Math. Comput. Methods Appl. Nucl. Sci. Eng.*, 2828–2839 (2013).
3. R. J. Brissenden and A. J. Garlick, "Biases in the estimation of Keff and its error by Monte-Carlo Methods," *Ann. Nucl. Energy* **13**, 63–83 (1986).
4. T. Ueki, F. B. Brown, D. K. Parsons, and D. E. Kornreich, "Autocorrelation and dominance ratio in Monte-Carlo criticality calculations," *Nucl. Sci. Eng.* **145**, 279–290 (2003).
5. E. F. Mitenkova and T. V. Semenova, "Using the TDMCC software to solve problems with a close-to-one dominant ratio," *Vopr. At. Nauki Tekh. Ser. Mat. Model. Fiz. Protsess.* (4), 3–13 (2015) [in Russian].
6. R. N. Blomquist, M. Amirshaw, D. Hanlon, N. Smith, Yo. Naito, J. Yang, Yo. Mioshi, T. Yamamoto, O. Jacquet, and J. Miss, *Source Convergence in Criticality Safety Analysis. Phase I: Results of Four Test Problems* (OECD/NEA, Paris, 2006).
7. G. E. Whitesides, "A difficulty in computing the k -effective of the World," *Trans. Am. Nucl. Soc.* **14** (2), 26–40 (1971).
8. E. F. Mitenkova, D. A. Koltashev, and P. A. Kizub, "Distribution of the fission reaction rate in a weakly coupled system for the "checkerboard" test model," *At. Energ.* **116** (6), 345–350 (2014) [in Russian].
9. E. F. Mitenkova and T. V. Semenova, "Calculation of neutron distribution functions in plane systems with extended inhomogeneous fuel sections," *At. Energ.* **126** (1), 15–19 (2019) [in Russian].
10. S. K. Godunov, *Modern Aspects of Linear Algebra* (Nauchn. Kniga, Novosibirsk, 1997) [in Russian].

11. T. V. Semenova, E. F. Mitenkova, and E. V. Solov'eva, "Fission matrix in the TDMCC program for calculating weakly coupled systems," *Vopr. At. Nauki Tekh. Ser. Yad.-Reakt. Konstanty* (2), 31–35 (2019) [in Russian].
12. F. R. Gantmakher, *Matrix Theory* (Fizmatlit, Moscow, 2004) [in Russian].
13. E. A. Biberdorf, E. F. Mitenkova, T. V. Semenova, and E. V. Solov'eva, "Method of associated invariant subspaces in problems of neutron distribution in weakly coupled systems," *Vopr. At. Nauki Tekh. Ser. Mat. Model. Fiz. Protsess.* (2), 3–16 (2022) [in Russian].
14. V. G. Bun'kov, S. K. Godunov, V. B. Kurzin, and M. Sadkane, "Application of the new mathematical apparatus 'One-dimensional spectral portraits of a matrix' to solving the problem of aeroelastic vibrations of blade arrays," *Uch. Zap. TsAGI* **40** (6), 3–13 (2009) [in Russian].

УДК 532.517.4

**ЛОКАЛЬНО-РАВНОВЕСНОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ В ЗАДАЧЕ О
ДИНАМИКЕ ПЛОСКОГО ТУРБУЛЕНТНОГО СЛЕДА В ПАССИВНО
СТРАТИФИЦИРОВАННОЙ СРЕДЕ**© 2024 В. Н. Гребенев^{1a}, А. Г. Деменков^{2,3b}, Г. Г. Черных^{1c}

¹ *Федеральный исследовательский центр
информационных и вычислительных технологий,
просп. Акад. Лаврентьева, 6, г. Новосибирск 630090, Россия,*
² *Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 1, г. Новосибирск 630090, Россия,*
³ *Новосибирский государственный технический университет,
просп. К. Маркса, 20, г. Новосибирск 630073, Россия*

E-mails: ^avngrebenev@gmail.com, ^bdemenkov@itp.nsc.ru, ^cchernykh@ict.nsc.ru

Поступила в редакцию 22.02.2023 г.; после доработки 27.04.2023 г.;
принята к публикации 07.06.2023 г.

Для исследования течения в дальнем плоском турбулентном следе в пассивно стратифицированной среде привлекается математическая модель, включающая в себя дифференциальные уравнения баланса энергии турбулентности, переноса скорости её диссипации, касательного турбулентного напряжения, дефекта плотности жидкости и вертикальной компоненты вектора потока массы. Алгебраическое усечение последнего уравнения приводит к известному градиентному соотношению для вертикальной компоненты вектора потока массы. Установлено, что при определённом ограничении на значения эмпирических постоянных математической модели и при согласующемся с математической моделью законе роста временного масштаба это соотношение является совместной дифференциальной связью модели. Показана эквивалентность локально-равновесного приближения для вертикальной компоненты вектора потока массы равенству нулю скобки Пуассона для обезразмеренных значений коэффициента турбулентной диффузии и осреднённой плотности. Приведены результаты численных экспериментов, иллюстрирующих теоретические результаты.

Ключевые слова: дальний плоский турбулентный след в пассивно стратифицированной среде, метод дифференциальных связей, локально-равновесное усечение, численное моделирование.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.102

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность исследования турбулентных течений обусловлена их чрезвычайной важностью в связи с изучением природных явлений, разработкой новых и усовершенствованием известных технических устройств. Проведение натурных и лабораторных исследований, как правило, и затруднительно, и дорогостояще. Поэтому определяющая роль отводится математическому моделированию путём проведения вычислительных экспериментов с привлечением иерархии математических моделей. И имеющиеся результаты экспериментального анализа турбулентных течений используются для тестирования математических моделей.

Одним из наиболее известных и распространённых подходов к построению математических моделей турбулентных течений является метод статистических моментов [1]. Гидродинамические поля в этом подходе являются случайными функциями и представляются в виде

суммы осреднённых и пульсационных составляющих. Такое представление после подстановки в уравнения Навье—Стокса приводит к известным уравнениям Рейнольдса, содержащим наряду с моментами первого порядка (осреднённые поля скорости, давления и температуры) моменты второго порядка (компоненты тензора рейнольдсовых напряжений и вектора потока скаляра). Для моментов второго порядка также могут быть получены дифференциальные уравнения их переноса, однако при этом в них появляются новые неизвестные корреляционные моменты второго и третьего порядков. Далее процесс может быть продолжен и задача математического моделирования турбулентного течения сводится к бесконечной системе дифференциальных уравнений переноса одноточечных корреляционных моментов. На практике [1, 2] часто ограничиваются моделями второго порядка замыкания. С этой целью для замыкания дифференциальных уравнений переноса моментов второго порядка привлекаются алгебраические представления неизвестных моментов второго и третьего порядков. Алгебраическое представление корреляционных моментов третьего порядка в целом ряде задач может быть получено с привлечением локально-равновесного приближения [1, 2], в соответствии с которым в уравнении переноса отбрасываются в предположении малости диффузионные и конвективные слагаемые, а неизвестные корреляционные моменты второго порядка (корреляции с пульсациями давления) моделируются. Полученная система дифференциальных уравнений достаточно сложна, поэтому можно попытаться упростить её, применив локально-равновесное усечение ко всем дифференциальным уравнениям переноса моментов второго порядка (либо к части уравнений). Следствием локально-равновесного усечения уравнений являются известные алгебраические градиентные представления моментов второго порядка. Естественным вопросом при применении алгебраического усечения уравнений переноса моментов гидродинамических полей является вопрос об обоснованности этого действия. Как уже отмечалось выше, алгебраическое усечение базируется на предположениях физического уровня строгости. В [3] предложена методология использования метода дифференциальных связей к обоснованию алгебраических параметризаций статистических моментов.

Отметим, что несмотря на успешное развитие других (относительно новых) подходов (метод моделирования крупных вихрей LES и его модификации, метод прямого численного моделирования DNS, комбинированные методы), основанные на замыкании моментных уравнений [1, 2] полуэмпирические модели турбулентности интенсивно совершенствуются и применяются при исследовании широкого класса турбулентных течений. В [4] с применением двухпараметрической $\epsilon - \omega$ модели турбулентности выполнено основанное на теоретико-групповом анализе исследование автомодельности вырождения течения в плоском турбулентном следе; осуществлено сопоставление с известными экспериментальными данными, получено удовлетворительное согласование. В [5] аналогичным способом анализируется автомодельность вырождения безымпulsiveного закрученного турбулентного следа за телом вращения. Применяется модифицированная $\epsilon - \epsilon$ модель турбулентности. Результаты расчётов согласуются с уникальными экспериментальными данными ИГиЛ СО РАН. В [6] выполнено численное моделирование течения, возникающего под воздействием ветровой нагрузки в устойчиво стратифицированном водоёме. Математическая модель базировалась на известном представлении Обухова—Прандтля коэффициента вертикального турбулентного обмена. Показано, что эта модель позволяет адекватно отразить основные характеристики процесса заглубления слоя перемешанной жидкости. В работах [7, 8] осуществлено уточнение известных полуэмпирических моделей турбулентности с использованием группы преобразований симметрии исходных уравнений гидродинамики. Построенная модификация $\epsilon - \epsilon$ модели турбулентности успешно применена к широкому классу канонических течений. В [9, 10] выполнено основанное на машинном обучении уточнение алгебраических представлений компонент тензора рейнольдсовых напряжений с целью более детального учёта анизотропии ряда турбулентных течений. Уточнённые модели приводят к лучшему согласованию с DNS-данными для ряда течений.

Разработанный в [3] подход к обоснованию алгебраических представлений моментов вто-

рого и третьего порядков гидродинамических полей успешно применён к исследованию плоских турбулентных следов с варьируемым суммарным избыточным импульсом в однородной жидкости [11, 12]. В [11] показано, что алгебраическое представление касательного турбулентного напряжения (соотношение Колмогорова—Прандтля) является дифференциальной связью математической модели, включающей дифференциальное уравнение переноса этой величины. Следствием локально-равновесного усечения [12] уравнения переноса тройной корреляции турбулентных флуктуаций вертикальной компоненты скорости является известная алгебраическая модель Ханьялича—Лаундера [2].

В настоящей работе с использованием подхода, основанного на методе дифференциальных связей [3], обосновывается локально-равновесное усечение уравнения переноса вертикальной компоненты вектора потока массы в задаче о плоском турбулентном следе в пассивно стратифицированной среде [13–15]. Приведены результаты численных экспериментов, иллюстрирующих теоретические результаты. Продемонстрирована малость скобки Пуассона, связывающей коэффициент турбулентной диффузии и осреднённую плотность.

1. УРАВНЕНИЯ ПЛОСКОГО ТУРБУЛЕНТНОГО СЛЕДА В ПАСИВНО СТРАТИФИЦИРОВАННОЙ СРЕДЕ

Система уравнений дальнего плоского турбулентного следа в пассивно стратифицированной среде имеет следующий вид [11, 15, 16]:

$$U_0 \frac{\partial U_1}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \langle u'v' \rangle, \quad (1)$$

$$U_0 \frac{\partial e}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \nu_t \frac{\partial e}{\partial y} + P - \epsilon, \quad (2)$$

$$U_0 \frac{\partial \epsilon}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial y} \nu_{t_1} \frac{\partial \epsilon}{\partial y} + \frac{\epsilon}{e} (C_{\epsilon_1} P - C_{\epsilon_2} \epsilon), \quad (3)$$

$$U_0 \frac{\partial \langle \rho_1 \rangle}{\partial x} = - \frac{\partial}{\partial y} \langle v' \rho' \rangle, \quad (4)$$

$$U_0 \frac{\partial}{\partial x} \langle u'v' \rangle = \frac{\partial}{\partial y} \nu_{t_2} \frac{\partial}{\partial y} \langle u'v' \rangle + C_{\phi_2} e \frac{\partial U_1}{\partial y} - C_{\phi_1} \langle u'v' \rangle \frac{\epsilon}{e}, \quad (5)$$

$$U_0 \frac{\partial \langle v' \rho' \rangle}{\partial x} = 2 \frac{\partial}{\partial y} K_{1\rho} \frac{\partial \langle v' \rho' \rangle}{\partial y} - \langle v'^2 \rangle \frac{\partial}{\partial y} \langle \rho \rangle - C_{1\phi} \frac{\epsilon}{e} \langle v' \rho' \rangle. \quad (6)$$

Здесь $U_1 = U_0 - U$ — дефект продольной осреднённой компоненты скорости, U_0 — скорость набегающего потока (масштабным преобразованием переменной x величину U_0 можно положить равной 1), e — кинетическая энергия турбулентности, ϵ — скорость её диссипации, $\langle u'v' \rangle$ — касательное турбулентное напряжение, $\langle v' \rho' \rangle$ — вертикальная компонента вектора потока массы, $\langle \rho_1 \rangle$ — осреднённый дефект плотности жидкости: $\langle \rho_1 \rangle = \langle \rho \rangle - \rho_s(y)$, $\rho_s(y) = \rho_0(1 - ay)$ — линейная плотность невозмущённой среды, $\rho_0 = \rho_s(0)$, штрихами помечены пульсационные составляющие полей скорости и плотности, $\langle \cdot \rangle$ — знак осреднения; плотность жидкости считается линейной функцией температуры. Начало координат находится на задней кромке тела, x — горизонтальная, y — вертикальная оси. В уравнениях (1)–(6) отброшены в предположении малости слагаемые с молекулярной вязкостью и диффузией; используется приближение дальнего следа; величины

$$\nu_t = \nu_{t_1} = C_\mu \frac{e^2}{\epsilon}, \quad \nu_{t_2} = C_s C_\mu^{-1} \nu_{t_1}, \quad K_{1\rho} = C_{s\phi} \langle v'^2 \rangle \frac{e}{\epsilon} = \frac{2}{3} C_{s\phi} \frac{e^2}{\epsilon}$$

представляют собой коэффициенты турбулентной вязкости и диффузии; величина

$$P = \langle u'v' \rangle \frac{\partial U_1}{\partial y}$$

задаёт порождение энергии турбулентности за счёт градиентов осреднённого течения; $C_s, C_{s\phi}, C_\mu, C_\epsilon, C_{\epsilon_1}, C_{\epsilon_2}, C_{1\phi}, C_{\phi_1}, C_{\phi_2}, \sigma_\epsilon, \sigma_\epsilon$ — известные эмпирические постоянные [16]. Уравнения математической модели обезразмериваются с использованием масштаба скорости U_0 и масштаба длины D — диаметра тела. В дальнейшем, по возможности, сохраняются те же обозначения для обезразмеренных переменных, что и для размерных. Для обезразмеривания дефекта плотности используется представление

$$\langle \tilde{\rho}_1 \rangle = \langle \rho_1 \rangle / a D \rho_0, \quad a = -\rho_0^{-1} \frac{d\rho_s}{dy}.$$

2. ВЕРИФИКАЦИЯ ЛОКАЛЬНО-РАВНОВЕСНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ

Локально-равновесное приближение ЛРП [1] означает, что конвективный и диффузионный переносы пренебрежимо малы. Применяя эту концепцию к модели (1)–(6), получаем следующие ЛРП приближения: представление касательного напряжения Рейнольдса $\langle u'v' \rangle$, известное как соотношение Колмогорова–Прандтля [16]:

$$\langle u'v' \rangle = C_\mu \frac{e^2}{\epsilon} \frac{\partial U_1}{\partial y} \equiv C_\mu e \tau \frac{\partial U_1}{\partial y}, \quad (7)$$

$C_{\phi_2} = C_\mu C_{\phi_1}$ и представление вертикальной компоненты вектора потока массы

$$\langle v'\rho' \rangle = -C_{1\phi}^{-1} \langle v'^2 \rangle \tau \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial y}, \quad \tau = \frac{e}{\epsilon}. \quad (8)$$

Соотношения такого вида представляют собой редукцию дифференциального уравнения на инвариантное многообразие фазового пространства. Инвариантные многообразия эволюционных уравнений представляют собой дополнительные дифференциальные связи [17, 18], которые ведут к исследованию совместности переопределённых систем дифференциальных уравнений. Условие инвариантности многообразия формулируется следующим образом (см. [19]). Рассмотрим систему эволюционных уравнений E :

$$u_t^i = F^i(t, x, u^1, \dots, u^m, u_x^1, u_x^2, \dots), \quad i = 1, \dots, m.$$

Дополним систему дифференциальными связями H :

$$h_j(t, x, u^1, \dots, u^m, u_x^1, u_x^2, \dots) = 0, \quad j = 1, \dots, p,$$

где $p \geq m$. Запись $G|_M = 0$ означает, что равенство $G = 0$ выполняется на множестве M . Дифференциальные связи H задают инвариантное многообразие системы E , если имеют место равенства

$$D_t(h_j)|_{[E] \cup [H]} = 0, \quad j = 1, \dots, p, \quad (9)$$

где $[\cdot]$ — система уравнений и её дифференциальные следствия относительно x . Методы исследования переопределённых систем описаны в [19]. Проблема нахождения всех дифференциальных связей, совместных с рассматриваемыми дифференциальными уравнениями не является полностью алгоритмически решённой. Эффективные подходы нахождения определённого класса совместных дифференциальных связей разработаны в [18, 19]. Однако вопрос исследования на совместность дифференциальной связи с заданным дифференциальным уравнением (системой дифференциальных уравнений) требует только проверки условия инвариантности (9).

Будем использовать следующую теорему [3, 11].

Теорема 1. Положим $\sigma_\epsilon = C_{\epsilon_1} = 1$. Тогда $\tau = \tau_h = U_0^{-1}(C_{\epsilon_2} - 1)(x + x_0)$ — точное решение уравнения (10).

Доказательство. Действительно, уравнение на τ имеет следующий вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tau}{\partial x} = \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial e}{\partial x} - \frac{e}{\epsilon^2} \frac{\partial \epsilon}{\partial x} = U_0^{-1} \left(\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial}{\partial y} \nu_{t_1} \frac{\partial e}{\partial y} + \frac{P}{\epsilon} - 1 - \frac{e}{\epsilon^2} \frac{\partial}{\partial y} \nu_{t_2} \frac{\partial \epsilon}{\partial y} - \frac{1}{\epsilon} (C_{\epsilon_1} P - C_{\epsilon_2} \epsilon) \right) = \\ U_0^{-1} \left(\frac{1}{\epsilon} \frac{\partial}{\partial y} C_\mu \tau^2 e \frac{\partial \epsilon}{\partial y} + \frac{1}{\epsilon} \frac{\partial}{\partial y} C_\mu \tau e \epsilon \frac{\partial \tau}{\partial y} + \frac{P}{\epsilon} - 1 - \frac{1}{\epsilon} \tau \frac{\partial}{\partial y} \frac{C_\mu}{\sigma_\epsilon} \tau e \frac{\partial \epsilon}{\partial y} - \frac{1}{\epsilon} C_{\epsilon_1} P + C_{\epsilon_2} \right). \end{aligned} \quad (10)$$

Тогда для $\sigma_\epsilon = 1$ (рекомендованное значение из [20]) и $C_{\epsilon_1} = 1$ (рекомендованное значение [20] равно 1.4) $\tau = \tau_h = U_0^{-1}(C_{\epsilon_2} - 1)(x + x_0)$ является точным решением уравнения (10). $\square$

Рассмотрим сначала дифференциальную связь (7) и определим множество

$$M = \left(e, \tau, U_1, : \mathcal{H}(e, \tau, U_1, \langle u'v' \rangle) \equiv \langle u'v' \rangle - C_\mu e \tau \frac{\partial U_1}{\partial y} = 0 \right). \quad (11)$$

Проверка условия на её совместность с уравнениями (1)–(6) сводится к исследованию на инвариантность (11) относительно потока, порождённого только уравнениями (1)–(3), (5).

Теорема 2. Пусть $(e, \tau, U_1, \langle u'v' \rangle, \langle \rho_1 \rangle, \langle v' \rho' \rangle)$ — достаточно гладкое решение системы (1)–(6) и $\tau = \tau_h$. В дополнение к приведённым соотношениям на константы положим $C_s = C_\mu$. Тогда множество M является инвариантным многообразием системы (1)–(6) при $\tau = \tau_h$, если и только если скобка Пуассона $\{\tau_h e, U_1\} = 0$.

Доказательство. Доказательство теоремы основано на непосредственных вычислениях производной:

$$D_x \mathcal{H}(e, \tau, U_1, \langle u'v' \rangle) = \langle u'v' \rangle_x - C_\mu (e_x \tau U_{1y} + e \tau_x U_{1y} + e \tau U_{1yx}). \quad (12)$$

Вычисление производной $\langle u'v' \rangle_x$ с учётом уравнений (5), (7) приводит к равенству

$$\langle u'v' \rangle_x = A \tau^2 \left[(\langle e \rangle_y)^2 U_{1y} + e [e_y U_{1y}]_y + 2 e e_y U_{1yy} + e^2 U_{1yyy} \right] U_0^{-1},$$

где $A = C_s C_\mu$. Вычисление $C_\mu e \tau U_{1yx}$ с учётом (1) даёт

$$C_\mu e \tau U_{1yx} = B \tau^2 (e e_y U_{yy} + e^2 U_{yyy}) U_0^{-1},$$

где $B = C_\mu^2$. Объединяя полученные представления и полагая $A = B$, имеем

$$\langle u'v' \rangle_x = A \tau^2 (e_y^2 U_{1y} + e e_y U_{1yy}) U_0^{-1}. \quad (13)$$

Подставляя (13) в правую часть (12) и используем дифференциальное следствие уравнения (1) для представления (13), получаем

$$D_x \mathcal{H}(e, \tau, U_1, \langle u'v' \rangle) = -C_\mu [(\tau e)_x U_{1y} - \tau e_y U_{1x}] \equiv -C_\mu \{\tau_h e, U_1\}.$$

Таким образом, условие инвариантности множества M эквивалентно равенству нулю скобки Пуассона $\{\tau_h e, U_1\}$, что доказывает теорему 2. $\square$

Рассмотрим далее дифференциальную связь (8) и определим множество

$$N = \left(\langle \rho \rangle, \tau, \langle v'^2 \rangle, : \mathcal{O}(\langle \rho \rangle, \tau, \langle v'^2 \rangle, \langle v' \rho' \rangle) \equiv \langle v' \rho' \rangle + C_{1\phi}^{-1} \langle v'^2 \rangle \tau \frac{\partial \langle \rho \rangle}{\partial y} = 0 \right). \quad (14)$$

Проверка условия на её совместность с уравнениями (1)–(6) сводится к исследованию на инвариантность (14) относительно потока, порождённого уравнениями (2)–(4), (6).

Теорема 3. Пусть $(e, \tau, U_1, \langle u'v' \rangle, \langle \rho_1 \rangle, \langle v'\rho' \rangle)$ — достаточно гладкое решение системы (1)–(6) и $\tau = \tau_h$. В дополнение к приведённым соотношениям на константы положим $C_{s\phi} = C_{1\phi}^{-1}$. Тогда множество N является инвариантным многообразием системы (1)–(6) при $\tau = \tau_h$, если и только если скобка Пуассона $\{\tau_h \langle v'^2 \rangle, \langle \rho \rangle\} = 0$.

Доказательство. Доказательство теоремы основано на непосредственных вычислениях производной:

$$D_x \mathcal{O}(\langle \rho \rangle, \tau, \langle v'^2 \rangle, \langle v'\rho' \rangle) = \langle v'\rho' \rangle_x + C_{1\phi}^{-1} (\langle v'^2 \rangle_x \tau \langle \rho \rangle_y + \langle v'^2 \rangle \tau_x \langle \rho \rangle_y + \langle v'^2 \rangle \tau \langle \rho \rangle_{yx}). \quad (15)$$

Вычисление производной $\langle v'\rho' \rangle_x$ с учётом уравнений (6), (8) приводит к равенству

$$\langle v'\rho' \rangle_x = -D_1 \tau^2 \left[(\langle v'^2 \rangle_y)^2 \langle \rho \rangle_y - \langle v'^2 \rangle \langle \rho \rangle_y \langle v'^2 \rangle_{yy} - 3 \langle v'^2 \rangle \langle v'^2 \rangle_y \langle \rho \rangle_{yy} - (\langle v'^2 \rangle)^2 \langle \rho \rangle_{yyy} \right] U_0^{-1},$$

где $D_1 = 2C_{s\phi}C_{1\phi}^{-1}$. Вычисление производной $\langle v'^2 \rangle \tau \langle \rho \rangle_{yx}$ с учётом (4) даёт

$$C_{1\phi}^{-1} \langle v'^2 \rangle \tau \langle \rho \rangle_{yx} = E \tau^2 \left[2 \langle v'^2 \rangle \langle v'^2 \rangle_y \langle \rho \rangle_{yy} - \langle v'^2 \rangle \langle \rho \rangle_y \langle v'^2 \rangle_{yy} + (\langle v'^2 \rangle)^2 \langle \rho \rangle_{yyy} \right],$$

где $E = C_{1\phi}^{-2}$. Объединяя полученные представления и полагая $D_1 = E$, имеем

$$\langle v'\rho' \rangle_x + C_{1\phi}^{-1} \langle v'^2 \rangle \tau \langle \rho \rangle_{yx} = -D_1 \tau^2 (\langle v'^2 \rangle_y)^2 \langle \rho \rangle_y - D_1 \tau^2 \langle v'^2 \rangle \langle v'^2 \rangle_y \langle \rho \rangle_{yy}. \quad (16)$$

Подставляя (13) в правую часть (15) и используя дифференциальное следствие уравнения (4) для представления (16), получаем

$$D_x \mathcal{O}(\langle \rho \rangle, \tau, \langle v'^2 \rangle, \langle v'\rho' \rangle) = C_{1\phi}^{-1} [(\tau \langle v'^2 \rangle)_x \langle \rho \rangle_y - \tau \langle v'^2 \rangle_y \langle \rho \rangle_x] \equiv C_{1\phi}^{-1} \{\tau_h \langle v'^2 \rangle, \langle \rho \rangle\}.$$

Таким образом, условие инвариантности множества N эквивалентно равенству нулю скобки Пуассона $\{\tau_h \langle v'^2 \rangle, \langle \rho \rangle\}$, что доказывает теорему 3. $\square$

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

Основываясь на представленных выше теоретических результатах, авторы выполнили серию численных экспериментов. Математическую модель, включающую систему дифференциальных уравнений (1)–(6), будем называть моделью 1. Математическую модель, включающую уравнения (1)–(3), (5), назовём моделью 2.

Первая серия численных экспериментов заключалась в следующем. В модели 2 воспользуемся локально-равновесным усечением уравнения (5) и получим хорошо известное [16] соотношение Колмогорова—Прандтля (7), замыкающее уравнение (1). Систему уравнений (1)–(3), включающую замкнутое уравнение (1), назовём моделью 3. Для моделей 2, 3 ставились следующие краевые условия

$$\begin{aligned} \frac{\partial U_1}{\partial y} = \frac{\partial e}{\partial y} = \frac{\partial \epsilon}{\partial y} = \langle u'v' \rangle = 0 \quad \text{при} \quad y = 0, x \geq x_{01}; \\ U_1 = e = \epsilon = \langle u'v' \rangle = 0 \quad \text{при} \quad y \rightarrow \infty, x \geq x_{01}. \end{aligned}$$

Граничное условие для касательного напряжения задаётся лишь для модели 2.

Начальные данные при расчётах по модели 3 задавались при $x_{01} = 625D$ согласованными с результатами лабораторных экспериментов [21]. Построение конечно-разностного алгоритма и его тестирование обсуждаются в [11]. В настоящей работе использовалась разнесённая разностная сетка: величины $\langle u'v' \rangle$ и $\langle v'\rho' \rangle$ рассчитывались в узлах, являющихся серединой ячеек основной сетки. Параметры сеточной области выбирались следующими: $x^n = x_{01} + n \cdot \Delta x$,

$y_j = (j - 1) \cdot h_y$, $n = 1, \dots, N_x$, $j = 1, \dots, M_y$. В расчётах полагались $\Delta x = 0,05$, $h_y = 0,05$, $M_y = 900$. Измельчение параметров сетки в два раза приводило к отклонениям решения не более 0,5% в равномерной норме. Расчёты проводились вплоть до значений $x = 2500D$. При $x = 1900D$ в численный эксперимент включалась модель 2. Начальное условие для касательного напряжения определялось из соотношения (7). На расстоянии $x = 2100D$ результаты расчётов по моделям 2, 3 сопоставлялись. Поскольку выполненные с учётом условий теорем 1, 2 ($c_{\epsilon 1} = \sigma_\epsilon = 1$) результаты численных экспериментов с моделями 2, 3 были уже представлены ранее [11], в настоящей работе мы остановимся на расчётах с использованием известного набора эмпирических постоянных [20]: $C_\mu = 0,09$, $C_s = 0,1$, $C_{\epsilon 1} = 1,4$, $C_{\epsilon 2} = 1,95$, $C_{\phi 1} = 2,8$, $C_{\phi 2} = C_\mu C_{\phi 1}$, $\sigma_e = \sigma_\epsilon = 1$. На рис. 1 сопоставляются рассчитанные по моделям 2, 3 профили дефекта продольной компоненты скорости U_1/U_0 для расстояния $x/D = 2100$. На рис. 2 сопоставляются найденные по моделям 2, 3 значения касательного турбулентного напряжения $\langle u'v' \rangle / U_0^2$. Расчёты по модели 2 показаны сплошной линией, по модели 3 — пунктирной. Можно видеть, что для стандартного набора эмпирических постоянных результаты расчётов достаточно близки и демонстрируют разумность локально-равновесного представления (7).

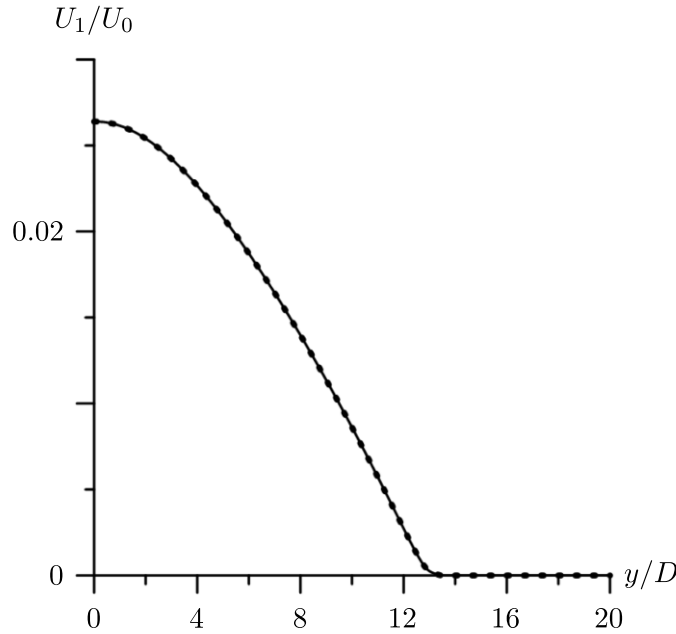


Рис. 1. Рассчитанное на основе двух математических моделей поперечное распределение дефекта продольной компоненты скорости U_1 при $x/D = 2100$

Дальнейшие численные эксперименты проводились с целью демонстрации применимости локально-равновесного представления (8).

Назовём моделью 4 систему дифференциальных уравнений (1)–(4), (6) с замкнутым на основе (7) уравнением (1). Моделью 5 назовём математическую модель, включающую уравнения (1)–(4), в которой (1) замкнуто посредством (7), а уравнение (4) — посредством (8). Дополним также краевые условия

$$\begin{aligned} \langle \rho_1 \rangle &= \frac{\partial \langle v' \rho' \rangle}{\partial y} = 0 \text{ при } y = 0, x \geq x_{01}; \\ \langle \rho_1 \rangle &= \langle v' \rho' \rangle = 0 \text{ при } y \rightarrow \infty, x \geq x_{01}. \end{aligned}$$

В качестве начальных условий в модели 5 при $x = x_{01} = 625D$ ставились нулевые начальные условия для $\langle \rho_1 \rangle$ и начальный профиль для $\langle v' \rho' \rangle$ исходя из соотношения (8). Эмпирические постоянные задавались стандартными [16, 20]: $C_s = 0,1$, $C_{s\phi} = 0,11$, $C_\mu = 0,09$, $C_{\epsilon 1} = 1,4$, $C_{\epsilon 2} = 1,95$, $C_{1\phi} = 3,2$, $C_{\phi 1} = 2,8$, $C_{\phi 2} = C_\mu C_{\phi 1}$, $\sigma_e = \sigma_\epsilon = 1$.

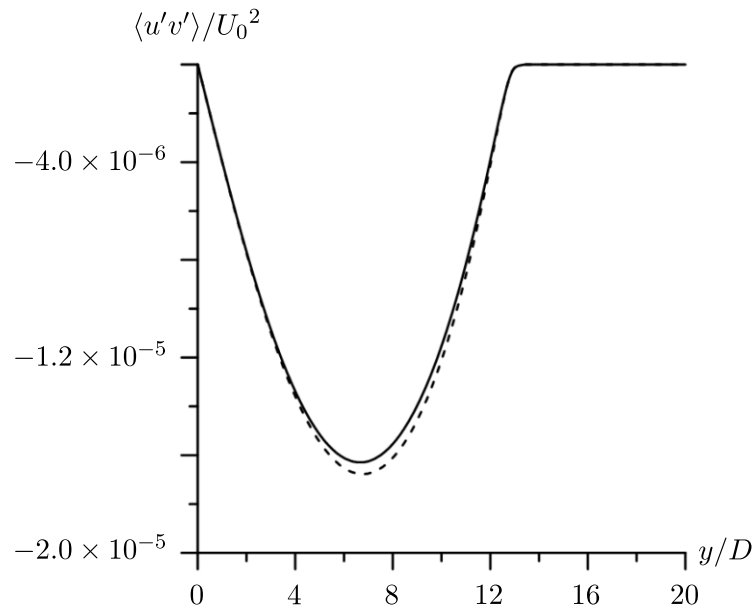


Рис. 2. Рассчитанное на основе двух математических моделей поперечное распределение касательного турбулентного напряжения $\langle u'v' \rangle$ при $x/D = 2100$

Относящаяся к моделям 4, 5 серия численных экспериментов начиналась с расчётов по модели 5; при $x = 1900D$ подключалась модель 4. Результаты расчётов по моделям 4, 5 сопоставляются на рис. 3, 4. Рис. 3 демонстрирует распределение дефекта плотности для расстояния $x = 2100D$. На рис. 4 приведено распределение $\langle v'\rho' \rangle$ для того же расстояния. Рис. 3, 4, как и рис. 1, 2, также демонстрируют применимость алгебраического представления (8). Расчёты по модели 4 показаны сплошной линией, по модели 5 — пунктирной. В дополнение к результатам рис. 1–4 на рис. 5 показано поведение характерного временного масштаба $\tau = e/\epsilon$.

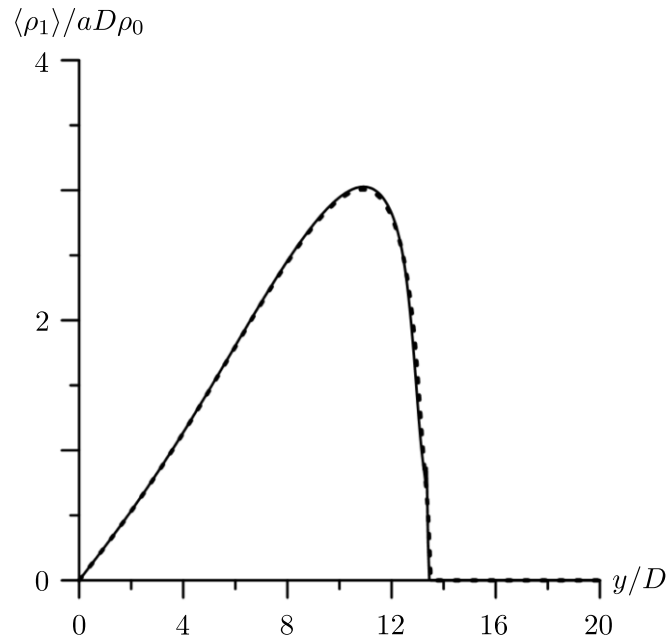


Рис. 3. Рассчитанное на основе двух математических моделей поперечное распределение осреднённого дефекта плотности жидкости ρ_1 при $x/D = 2100$

Результаты расчётов на двух сетках с параметрами сетки по переменным x и y , характе-

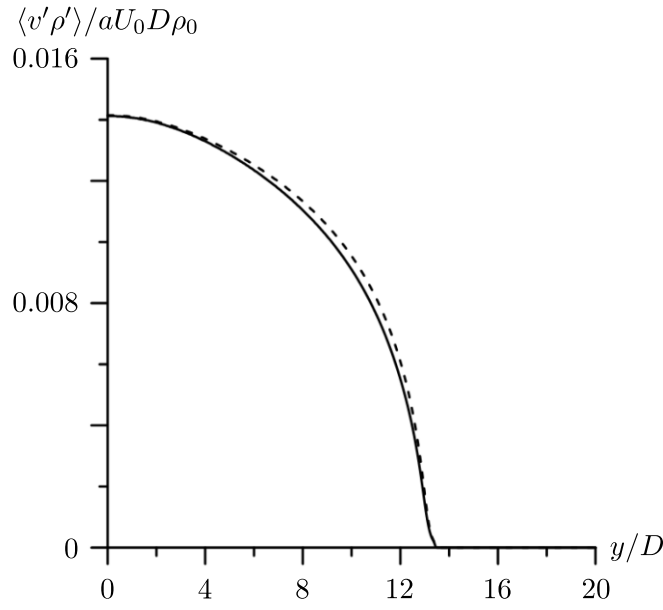


Рис. 4. Рассчитанное на основе двух математических моделей поперечное распределение вертикальной компоненты вектора потока массы $\langle v' \rho' \rangle$ при $x/D = 2100$

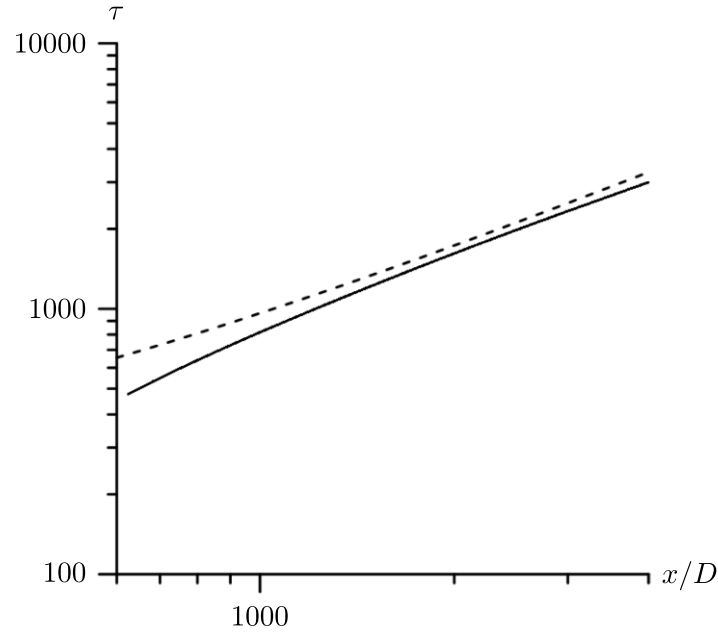


Рис. 5. Изменение временного масштаба $\tau = e/\epsilon$ в зависимости от расстояния от тела: сплошная линия — $\tau' = e(x, 0) U_0 / \epsilon(x, 0) D$, штриховая линия — $0,77(x/D + 250)$

ризуемыми $\Delta x = 0,05$, $h_y = 0,05$ (сетка 1) и $\Delta x = 0,0125$, $h_y = 0,025$ (сетка 2) показывают, что значения конечно-разностного аналога скобок Пуассона $\{\tau_h e, U_1\}$ и $\{\tau_h \langle v'^2 \rangle, \langle \rho \rangle\}$ на больших расстояниях от тела близки к нулю для всех сеточных параметров. В таблице представлены значения величин δ_u^n и δ_ρ^n ,

$$\delta_u^n = \frac{\max_j \left| (U_{1x}^h (e^2/\epsilon)_y^h)_j^n - (U_{1y}^h (e^2/\epsilon)_x^h)_j^n \right|}{\max_j (|\nabla^h (e^2/\epsilon)|_j^2, |\nabla^h U_1|_j^2)}, \quad (17)$$

$$\delta_{\rho}^n = \frac{\max_j \left| (\langle \rho \rangle_x^h (e^2/\epsilon)_y^h)_j^n - (\langle \rho \rangle_y^h (e^2/\epsilon)_x^h)_j^n \right|}{\max_j (|\nabla^h (e^2/\epsilon)|_j^2, |\nabla^h \langle \rho \rangle|_j^2)}, \quad (18)$$

рассматриваемые как функции расстояния от тела и при $x = x^n$ характеризующие конечно-разностные аналоги скобок Пуассона $\{\tau_h e, U_1\}$ и $\{\tau_h \langle v'^2 \rangle, \langle \rho \rangle\}$. Индексы 1 и 2 соответствуют разным расчётным сеткам. В (17), (18) $(U_{1x}^h)_j$, $(U_{1y}^h)_j$, $(\langle \rho \rangle_x^h)_j$, $(\langle \rho \rangle_y^h)_j$, $((e^2/\epsilon)_x^h)_j$, $((e^2/\epsilon)_y^h)_j$, $(\nabla^h U_1)_j$, $(\nabla^h \langle \rho \rangle)_j$, $(\nabla^h (e^2/\epsilon))_j$ — конечно-разностные аппроксимации первых частных производных и градиентов в точках $(x^n, y_j) : x^n = x_{01} + n \cdot \Delta x$, $y_j = (j-1) \cdot h_y$, $n = 1, \dots, N_x$, $j = 1, \dots, M_y$.

Значения δ_u^n и δ_{ρ}^n при различных расстояниях от тела, полученные в расчётах на последовательности сеток

x/D	δ_{u1}^n	δ_{u2}^n	$\delta_{\rho1}^n$	$\delta_{\rho2}^n$
625	$0.121 \cdot 10^{-3}$	$0.197 \cdot 10^{-3}$	$0.815 \cdot 10^{-3}$	$0.123 \cdot 10^{-2}$
1000	$0.257 \cdot 10^{-4}$	$0.257 \cdot 10^{-4}$	$0.577 \cdot 10^{-6}$	$0.282 \cdot 10^{-6}$
1500	$0.878 \cdot 10^{-5}$	$0.878 \cdot 10^{-5}$	$0.664 \cdot 10^{-6}$	$0.274 \cdot 10^{-6}$
1900	$0.845 \cdot 10^{-5}$	$0.845 \cdot 10^{-5}$	$0.400 \cdot 10^{-6}$	$0.174 \cdot 10^{-6}$
2100	$0.837 \cdot 10^{-5}$	$0.837 \cdot 10^{-5}$	$0.245 \cdot 10^{-6}$	$0.114 \cdot 10^{-6}$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты работы сводятся к следующему. При исследовании дальнего плоского турбулентного следа в пассивно стратифицированной среде рассмотрена математическая модель, включающая в себя дифференциальные уравнения переноса касательного турбулентного напряжения $\langle u'v' \rangle$ и вертикальной компоненты вектора потока массы $\langle v'\rho' \rangle$. Следствием локально-равновесного усечения этих двух уравнений являются хорошо известные алгебраические соотношения (7), (8). Теоретически показано, что эти алгебраические соотношения являются дифференциальными связями математической модели. Приведены результаты численных экспериментов, иллюстрирующих реализуемость соответствующих алгебраических параметризаций.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Результаты получены в рамках работы по теме «Разработка и исследование вычислительных технологий решения фундаментальных и прикладных задач аэро-, гидро- и волновой динамики» государственного задания Федерального исследовательского центра информационных и вычислительных технологий. Численные эксперименты выполнены в рамках государственного задания Института теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН (проект 122041400020-6). Постановка задачи и результаты расчётов обсуждались соавторами совместно. Других источников финансирования проведения или руководства данным конкретным исследованием не было.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

- Монин А. С. Яглом А. М. Статистическая гидромеханика. Теория турбулентности. Том 1,2. СПб.: Гидрометеиздат, 1992–1996.

2. *Hanjalic K., Launder B. E.* Reassessment of modeling turbulence via Reynolds averaging: A review of second-moment transport strategy // *Phys. Fluids*. 2021. V. 33, N 9. Article 091302; DOI: 10.1063/5.0065211
3. Гребенев В. Н., Илюшин Б. Б. О применении дифференциальных связей для анализа моделей турбулентности // Доклады АН. 2000. Т. 374, № 6. С. 761–764.
4. Шмидт А. В. Автомодельные решения модели дальнего турбулентного следа // Изв. РАН. МЖГ. 2019. № 2, С. 94–98; DOI: 10.1134/S0568528119010134
5. *Shmidt A. V.* Similarity in the far swirling momentumless turbulent wake // *J. Sib. Fed. Univ. Math. Phys.* 2020. V. 13. N 1. P. 79–86; DOI: 10.17516/1997-1397-2020-13-1-79-86
6. *Belolipetskii V. M., Genova S. N.* On application of Prandtl–Obukhov formula in the numerical model of the turbulent layer depth dynamics // *J. Sib. Fed. Univ. Math. Phys.* 2020. V. 13. N 1. P. 37–47; DOI: 10.17516/1997-1397-2020-13-1-37-47
7. *Kingenberg D., Oberlack M., Pluемacher D.* Symmetries and turbulence modelling // *Phys. Fluids*. 2020. V. 32, N 2. Article 025108; DOI: 10.1063/1.5141165
8. *Kingenberg D., Oberlack M.* Statistically invariant eddy viscosity models // *Phys. Fluids*. 2022. V. 34, N 5. Article 05514; DOI: 10.1063/5.0090988
9. *Kaandorp M. L. A., Dwight R. P.* Data-driven modelling of the Reynolds stress tensor using random forests with invariance // *Comput. Fluids*. 2020. V. 202. Article 104497; DOI: 10.1016/j.compfluid.2020.104497
10. Бернар А., Яковенко С. Н. Усовершенствование RANS-моделей с помощью случайного леса с тензорным базисом для турбулентных течений в двумерных каналах с выступами // Прикл. механика и техн. физика. 2023. Т. 64, № 3. С. 89–94; DOI: 10.15372/PMTF202215201
11. *Grebenev V. N., Demenkov A. G., Chernykh G. G., Grichkov A. N.* Local equilibrium approximation in free turbulent flows: verification through the method of differential constraints // *ZAMM Z. Angew. Math. Mech.* 2021. V. 117, N 9. Article e202000095; DOI: 10.1002/zamm.202000095
12. Гребенев В. Н., Деменков А. Г., Черных Г. Г. Метод дифференциальных связей: локально-равновесное приближение в безымпulseном плоском турбулентном следе // Прикл. механика и техн. физика. 2021. Т. 62, № 3. С. 38–47; DOI: 10.15372/PMTF20210304
13. *Alexopoulos C. C., Keffer J. F.* Turbulent Wake in a Passively Stratified Field // *Phys. Fluids*. 1971. V. 14, N 2, P. 216–224.
14. *Durbin P. A., Hunt J. C. R., Firth D.* Mixing by a turbulent wake of a uniform temperature gradient in the approach flow // *Phys. Fluids*. 1982. V. 25, N 4, P. 588–591.
15. Ефремов И. А., Капцов О. В., Черных Г. Г. Автомодельные решения двух задач свободной турбулентности // Матем. моделирование. 2009. Т. 21, № 12. С. 137–144.
16. *Rodi W.* Turbulence models and their application in hydraulics. A state of the art review. Delft: IAHR, 1980.
17. Яненко Н. Н. Теория совместности и методы интегрирования систем нелинейных уравнений в частных производных // Тр. 4-го Всесоюз. мат. съезда. 1964. Т. 2. С. 247–252.
18. Сидоров А. Ф., Шапеев В. П., Яненко Н. Н. Метод дифференциальных связей и его приложения в газовой динамике. Новосибирск: Наука, 1988.
19. Андреев В. К., Капцов О. В., Пухначев В. В., Родионов А. А. Применение теоретико-групповых методов в гидродинамике. Новосибирск: Наука, 1994.
20. *Harsha P. T.* Kinetic Energy Methods // *Handbook of Turbulence. Volume 1 Fundamentals and Applications*. 1977. P. 187–235.
21. *Hinze J. O.* Turbulence. Second edition. N. Y.: McGraw-Hill College, 1975.

UDC 532.517.4

LOCAL EQUILIBRIUM APPROACH IN THE PROBLEM OF THE DYNAMICS OF A PLANE TURBULENT WAKE IN A PASSIVELY STRATIFIED MEDIUM

© 2024 V. N. Grebenev^{1a}, A. G. Demenkov^{2,3b}, G. G. Chernykh^{1c}

¹*Federal Research Center for Information and Computational Technologies,
Novosibirsk, 630090 Russia,*

²*Kutateladze Institute of Thermophysics, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences,
Novosibirsk, 630090 Russia,*

³*Novosibirsk State Technical University, Novosibirsk, 630073 Russia*

E-mails: ^avngrebenev@gmail.com, ^bdemenkov@itp.nsc.ru, ^cchernykh@ict.nsc.ru

Received 22.02.2023, revised 27.04.2023, accepted 07.06.2023

Abstract. To study the flow in a far plane turbulent wake in a passively stratified medium, we use a mathematical model that includes differential equations for the balance of turbulence energy, the transfer of its dissipation rate, shear turbulent stress, a defect of the density of the liquid, and the vertical component of the mass flux vector. Algebraic truncation of the last equation leads to a well-known gradient relation for the vertical component of the mass flux vector. It is established that under a certain constraint on the values of empirical constants in the mathematical model and the law of time scale growth consistent with the mathematical model, this relation is a differential constraint for the model. The equivalence of the local equilibrium approach for the vertical component of the mass flux vector and the zero Poisson bracket for the dimensionless turbulent diffusion coefficient and the averaged density is shown. The results of numerical experiments illustrating the theoretical results are presented.

Keywords: far plane turbulent wake in passively stratified medium, differential constraint method, local equilibrium truncation, numerical modeling.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.102

REFERENCES

1. A. S. Monin and A. M. Yaglom, *Statistical Fluid Mechanics: Mechanics of Turbulence* (Dover Publ., Mineola, 2007; Gidrometeoizdat, St. Petersburg, 1992–1996).
2. K. Hanjalić and B. E. Launder, “Reassessment of modeling turbulence via Reynolds averaging: A review of second-moment transport strategy,” *Phys. Fluids* **33** (9), 091302 (2021). <https://doi.org/10.1063/5.0065211>
3. V. N. Grebenev and B. B. Ilyushin, “Application of differential constraints to the analysis of turbulence models,” *Dokl. Phys.* **45** (10), 550–553 (2000).
4. A. V. Schmidt, “Self-similar solutions of the model $k - \omega$ for a turbulent far wake,” *Fluid Dyn.* **54** (2), 239–243 (2019). <https://doi.org/10.1134/S0015462819010130>
5. A. V. Schmidt, “Similarity in the far swirling momentumless turbulent wake,” *J. Sib. Fed. Univ. Math. Phys.* **13** (1), 79–86 (2020). <https://doi.org/10.17516/1997-1397-2020-13-1-79-86>
6. V. M. Belolipetskii and S. N. Genova, “On application of Prandtl–Obukhov formula in the numerical model of the turbulent layer depth dynamics,” *J. Sib. Fed. Univ. Math. Phys.* **13** (1), 37–47 (2020). <https://doi.org/10.17516/1997-1397-2020-13-1-37-47>

7. D. Kingenber, M. Oberlack, and D. Pluemacher, “Symmetries and turbulence modelling,” *Phys. Fluids* **32** (2), 025108 (2020). <https://doi.org/10.1063/1.5141165>
8. D. Kingenber and M. Oberlack, “Statistically invariant eddy viscosity models,” *Phys. Fluids* **34** (5), 05514 (2022). <https://doi.org/10.1063/5.0090988>
9. M. L. A. Kaandorp and R. P. Dwight, “Data-driven modelling of the Reynolds stress tensor using random forests with invariance,” *Comput. Fluids* **202**, 104497 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2020.104497>
10. A. Bernard and S. N. Yakovenko, “Enhancement of RANS models by means of the tensor basis random forest for turbulent flows in two-dimensional channels with bumps,” *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* **64** (3), 437–441 (2023). <https://doi.org/10.1134/S0021894423030094>
11. V. N. Grebenev, A. G. Demenkov, G. G. Chernykh, and A. N. Grichkov, “Local equilibrium approximation in free turbulent flows: verification through the method of differential constraints,” *ZAMM Z. Angew. Math. Mech.* **117** (9), e202000095 (2021). <https://doi.org/10.1002/zamm.202000095>
12. V. N. Grebenev, A. G. Demenkov, and G. G. Chernykh, “Method of Differential Constraints: Local Equilibrium Approximation in a Planar Momentumless Turbulent Wake,” *J. Appl. Mech. Tech. Phys.* **62** (3), 383–390 (2021). <https://doi.org/10.15372/PMTF20210304>
13. C. C. Alexopoulos and J. F. Keffer, “Turbulent wake in a passively stratified field,” *Phys. Fluids* **14** (2), 216–224 (1971).
14. P. A. Durbin, J. C. R. Hunt, and D. Firth, “Mixing by a turbulent wake of a uniform temperature gradient in the approach flow,” *Phys. Fluids* **25** (4), 588–591 (1982).
15. I. A. Efremov, O. V. Kaptsov, and G. G. Chernykh, “Self-similar solutions of two problems of free turbulence,” *Mat. Model.* **21** (12), 137–144 (2009) [in Russian].
16. W. Rodi, *Turbulence Models and Their Application in Hydraulics. A State of the Art Review* (IAHR, Delft, 1980).
17. N. N. Yanenko, “Compatibility theory and methods for integrating systems of nonlinear partial differential equations,” *Proc. 4th All-Union. Math. Congr.* **2**, 247–252 (Nauka, Leningrad, 1964) [in Russian].
18. A. F. Sidorov, V. P. Shapeev, and N. N. Yanenko, *Method of Differential Constraints and Applications in Gas Dynamics* (Nauka, Novosibirsk, 1988) [in Russian].
19. V. K. Andreev, O. V. Kaptsov, V. V. Pukhnachev, and A. A. Rodionov, *Applications of Group-Theoretical Methods in Hydrodynamics* (Springer, Dordrecht, 1998; Nauka, Novosibirsk, 1994).
20. P. T. Harsha, “Kinetic Energy Methods,” *Handbook of Turbulence. Vol. 1. Fundamentals and Applications* 187–235 (1977).
21. J. O. Hinze, *Turbulence* (McGraw-Hill College, New York, 1975).

УДК 519.4

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КУСОЧНО-ПАРАБОЛИЧЕСКОЙ РЕКОНСТРУКЦИИ ФИЗИЧЕСКИХ ПЕРЕМЕННЫХ В СХЕМЕ РУСАНОВА.

II. УРАВНЕНИЯ СПЕЦИАЛЬНОЙ РЕЛЯТИВИСТСКОЙ МАГНИТНОЙ ГИДРОДИНАМИКИ

© 2024 И. М. Куликов

*Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 6, г. Новосибирск 630090, Россия*

E-mail: kulikov@ssd.sccc.ru

Поступила в редакцию 10.06.2023 г.; после доработки 14.07.2023 г.;
принята к публикации 07.02.2024 г.

Как известно, схема Русанова для решения гидродинамических уравнений является одной из самых робастных в классе численных схем решения задачи Римана. Ранее было показано, что схема Русанова с использованием кусочно-параболической реконструкции физических переменных даёт малодиссипативную схему, качественно и количественно соответствующую схемам типа Рое и семейству схем Хартена—Лакса—Ван Леера при использовании аналогичной реконструкции. При этом в отличие от этих схем численное решение свободно от артефактов. В случае уравнений специальной релятивистской магнитной гидродинамики спектральное разложение для разрешения задачи Римана является достаточно сложным и не имеет аналитического решения. В статье предлагается развитие схемы Русанова с использованием кусочно-параболического представления решения на уравнения специальной релятивистской магнитной гидродинамики. Проведена верификация разработанной схемы на восьми классических задачах о распаде произвольного разрыва, описывающих основные особенности релятивистских замагнитченных течений.

Ключевые слова: вычислительная астрофизика, релятивистская магнитная гидродинамика, численные методы, метод Русанова, кусочно-параболический метод.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.103

ВВЕДЕНИЕ

Объекты во Вселенной с наибольшей светимостью помимо течений с релятивистскими скоростями характеризуются наличием магнитных полей. К таким объектам относятся активные ядра галактик, квазары, гамма-всплески, рентгеновские источники и внегалактические струи различной природы [1]. На масштабах порядка парсека конфигурации магнитного поля релятивистской струи имеют тороидальную [2], продольную [3] и спиральную [4] структуры. На масштабах порядка килопарсека магнитное поле уже выравнивается вдоль струи [5] или ортогонально ей [6]. Такая картина магнитного поля требует решения уравнений специальной релятивистской магнитной гидродинамики. Важной частью численных методов типа Годунова для решения гиперболических уравнений является решение задачи Римана и спектральное разложение якобиана одномерной системы. В случае уравнений специальной релятивистской магнитной гидродинамики спектральное разложение в общем виде приходится разрешать численно [7]. Для схемы Русанова достаточно использовать только характеристики, соответствующие быстрым магнитным волнам, аналитический вид которых можно записать аналитически [8]. В настоящей работе будет использована запись уравнений и процедура восстановления

физических переменных, приведённых в статье [9]. Для верификации будет использована система тестов в одномерной постановке из статьи [10].

В настоящей статье предлагается развитие схемы Русанова, описанной в работе [11] (Статья I) на уравнения специальной релятивистской магнитной гидродинамики. Во втором разделе описаны решаемые уравнения, процедура восстановления физических переменных при наличии магнитного поля, а также выписаны явные формулы для нахождения быстрых магнитных волн, необходимых для конструирования схемы Русанова. Третий раздел посвящён верификации построенного численного метода. В четвёртом разделе обсуждается ряд дискуссионных вопросов, связанные с разработанной методикой. В пятом разделе сформулировано заключение. Для заинтересованных в использовании схемы Русанова для численного решения уравнений специальной релятивистской магнитной гидродинамики читателей исходный код метода размещён на ресурсе GitFlic: <https://gitflic.ru/project/igorkulikov/rusanovrmhd1d>.

1. УРАВНЕНИЯ СПЕЦИАЛЬНОЙ РЕЛЯТИВИСТСКОЙ МАГНИТНОЙ ГИДРОДИНАМИКИ

Будем рассматривать физические переменные ρ — плотность, v_x, v_y, v_z — компоненты скорости, p — давление, B_x, B_y, B_z — компоненты магнитного поля. Введём безразмерную скорость света $c \equiv 1$. Определим Лоренц-фактор Γ по формуле

$$\Gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2}},$$

где $v^2 = v_x^2 + v_y^2 + v_z^2$. Будем понимать, что Лоренц-фактор достигает малых значений при $\Gamma \sim 1$, средних значений при $\Gamma \sim 10$ и больших значений при $\Gamma \sim 100$ и выше. Это условные названия Лоренц-фактора, выработанные при исследовании задач эволюции релятивистских джетов.

Используя показатель адиабаты γ , введём понятия специфической энтальпии h и скорость звука c_s по формулам

$$h = 1 + \frac{\gamma}{\gamma - 1} \frac{p}{\rho}, \quad c_s^2 = \frac{\gamma p}{\rho h}.$$

Используя физические переменные, введём консервативные переменные D — релятивистская плотность, S_x, S_y, S_z — релятивистский импульс и E — релятивистская полная энергия по формулам

$$\begin{aligned} D &= \rho \Gamma, \\ S_x &= (\rho h \Gamma^2 + B^2) v_x - (\vec{v}, \vec{B}) B_x, \\ S_y &= (\rho h \Gamma^2 + B^2) v_y - (\vec{v}, \vec{B}) B_y, \\ S_z &= (\rho h \Gamma^2 + B^2) v_z - (\vec{v}, \vec{B}) B_z, \\ E &= \rho h \Gamma^2 - p + \frac{B^2}{2} + \frac{v^2 B^2}{2} - \frac{(\vec{v}, \vec{B})^2}{2}, \end{aligned}$$

где $B^2 = B_x^2 + B_y^2 + B_z^2$ и $(\vec{v}, \vec{B}) = v_x B_x + v_y B_y + v_z B_z$.

Для консервативных величин запишем систему законов сохранения в векторной форме:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} = 0,$$

где вектор консервативных переменных U и вектора потоков F_x, F_y, F_z имеют вид

$$U = \begin{pmatrix} D \\ S_x \\ S_y \\ S_z \\ E \\ B_x \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix}, \quad F_x = \begin{pmatrix} Dv_x \\ S_x v_x + \left(p + \frac{B^2}{2\Gamma^2} + \frac{(\vec{v}, \vec{B})^2}{2}\right) - \left(\frac{B_x}{\Gamma^2} + (\vec{v}, \vec{B})v_x\right) B_x \\ S_y v_x \\ S_z v_x \\ S_x \\ 0 \\ B_y v_x - v_y B_x \\ B_z v_x - v_z B_x \end{pmatrix},$$

$$F_y = \begin{pmatrix} Dv_y \\ S_x v_y \\ S_y v_y + \left(p + \frac{B^2}{2\Gamma^2} + \frac{(\vec{v}, \vec{B})^2}{2}\right) - \left(\frac{B_y}{\Gamma^2} + (\vec{v}, \vec{B})v_y\right) B_y \\ S_z v_y \\ S_y \\ B_x v_y - v_x B_y \\ 0 \\ B_z v_y - v_z B_y \end{pmatrix},$$

$$F_z = \begin{pmatrix} Dv_z \\ S_x v_z \\ S_y v_z \\ S_z v_z + \left(p + \frac{B^2}{2\Gamma^2} + \frac{(\vec{v}, \vec{B})^2}{2}\right) - \left(\frac{B_z}{\Gamma^2} + (\vec{v}, \vec{B})v_z\right) B_z \\ S_z \\ B_x v_z - v_x B_z \\ B_y v_z - v_y B_z \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Дополнительное уравнение описывает соленоидальность магнитного поля:

$$\frac{\partial B_x}{\partial x} + \frac{\partial B_y}{\partial y} + \frac{\partial B_z}{\partial z} = 0.$$

Как уже было отмечено ранее пересчёт физических переменных их консервативных не может в общем случае быть записан в аналитической форме. Для восстановления физических переменных необходимо численная процедура на основе метода Ньютона. Для этого мы введём искомую переменную $X = Dh\Gamma$ и значение $Y = S_x B_x + S_y B_y + S_z B_z$. В этом случае, используя функцию энергии E и проведя некоторые тривиальные выкладки, можем записать уравнение

$$E = X - p + \frac{B^2}{2} + \frac{B^2 S^2 - Y^2}{2(B^2 + X)^2},$$

где $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$. В этом случае метод Ньютона для переменной X может быть записан в виде

$$X^{k+1} = X^k - \frac{f(X)}{df(X)/dX},$$

где функция $f(X)$ и её производная df/dX записываются в виде

$$f(X) = X - E - p + \frac{B^2}{2} + \frac{B^2 S^2 - Y^2}{2(B^2 + X)^2},$$

$$\frac{df}{dX} = \frac{dE}{dX} = 1 - \frac{dp}{dX} - \frac{B^2 S^2 - Y^2}{(B^2 + X)^3},$$

где, введя переменную $Z = \rho(h - 1)$ и учитывая $p = p(\rho, Z)$, выражение dp/dX вычисляется по формуле

$$\frac{dp}{dX} = \frac{\partial p}{\partial Z} \frac{dZ}{dX} + \frac{\partial p}{\partial \rho} \frac{d\rho}{dX}.$$

Перепишем переменную Z через X :

$$Z = \rho(h - 1) = \frac{\rho \Gamma^2}{\Gamma^2} (h - 1) = \frac{X - D\Gamma}{\Gamma^2}.$$

Опустим некоторые тривиальные, но громоздкие выкладки, получим:

$$\frac{dZ}{dX} = \frac{1}{\Gamma^2} + \frac{2}{X^3} \frac{\Gamma(D + 2Z\Gamma)}{2} \frac{Y^2 [3X(X + B^2) + B^4] + S^2 X^3}{(X + B^2)^3}.$$

Так как мы рассматриваем модель идеального газа, то $p = \frac{\gamma-1}{\gamma} Z$, а следовательно $\partial p / \partial \rho = 0$. После окончания итерационного процесса компоненты скорости вычисляются по формулам

$$v_x = \frac{1}{X + B^2} \left(S_x + \frac{Y}{X} B_x \right),$$

$$v_y = \frac{1}{X + B^2} \left(S_y + \frac{Y}{X} B_y \right), \quad v_z = \frac{1}{X + B^2} \left(S_z + \frac{Y}{X} B_z \right).$$

После пересчёта Лоренц-фактора Γ и переменной Z по формуле

$$Z = \frac{X - D\Gamma}{\Gamma^2}$$

пересчитывается значение давления p и плотности ρ по формулам

$$p = \frac{\gamma - 1}{\gamma} Z, \quad \rho = \frac{D}{\Gamma}.$$

Компоненты вектора магнитного поля являются консервативными переменными.

Численный метод на основе схемы Русанова подробно описан в работе [11]. При решении уравнений специальной релятивистской магнитной гидродинамики максимальный наклон характеристики соответствует быстрым магнитным волнам, которые вычисляются по формулам

$$\lambda_{FMW}^{\pm} = \frac{v_x (1 - \omega^2)}{1 - v^2 \omega^2 - R} \pm \frac{\sqrt{((v^2 - 1)\omega^2 + R)((v^2 - v_x^2)\omega^2 + v_x^2 - 1 + R)}}{1 - v^2 \omega^2 - R},$$

где величины R и ω определяются по формулам

$$R = \frac{c_s^2 (\vec{v}, \vec{B})^2}{\rho \left(h + \frac{B^2 + (\vec{v}, \vec{B})^2}{\Gamma^2} \right) \Gamma^2}, \quad \omega = c_s^2 + c_a^2 - c_s^2 + c_a^2,$$

где c_a — альфвеновская скорость, определяемая уравнением

$$c_a^2 = \frac{\frac{B^2 + (\vec{v}, \vec{B})^2}{\Gamma^2} \rho}{h + \frac{B^2 + (\vec{v}, \vec{B})^2}{\Gamma^2} \rho}.$$

Шаг по времени вычисляется аналогично работе [11].

2. ВЕРИФИКАЦИЯ ЧИСЛЕННОГО МЕТОДА

Верификацию численного метода будем производить на системе классических задач о распаде произвольного релятивистского магнитно гидродинамического разрыва из работ [12, 13] путём сравнения с аналитическим решением из работы [14]. На каждом рисунке изображены (a) ρ — плотность, (c) v_x — продольная и (d) v_y — поперечная скорости, (e) B_y , (f) B_z — поперечные компоненты магнитного поля, (b) $P = p + \frac{B^2/\Gamma^2 + (\vec{v}, \vec{B})^2}{2}$ — полное давление. Во всех вычислительных экспериментах было использовано 800 ячеек и число Куранта $CFL = 0.1$. Начальный разрыв находится в точке $x_0 = 0$.

2.1. Тест Коммиссарова № 1

Будем рассматривать эволюцию замагниченного газа с показателем адиабаты $\gamma = 4/3$ на интервале $[-2; 2]$ до момента времени $t = 1$. В начальный момент времени параметры газа выбраны слева: $\rho^L = 1$ — плотность, $p^L = 1000$ — давление, $v_x^L = 0$, $v_y^L = 0$, $v_z^L = 0$ — компоненты скорости, $B_x^L = 1$, $B_y^L = 0$, $B_z^L = 0$ — компоненты магнитного поля, и справа: $\rho^R = 0.1$ — плотность, $p^R = 1$ — давление, $v_x^R = 0$, $v_y^R = 0$, $v_z^R = 0$ — компоненты скорости, $B_x^R = 1$, $B_y^R = 0$, $B_z^R = 0$ — компоненты магнитного поля. На рис. 1 изображены результаты сравнения численного и аналитического решения.

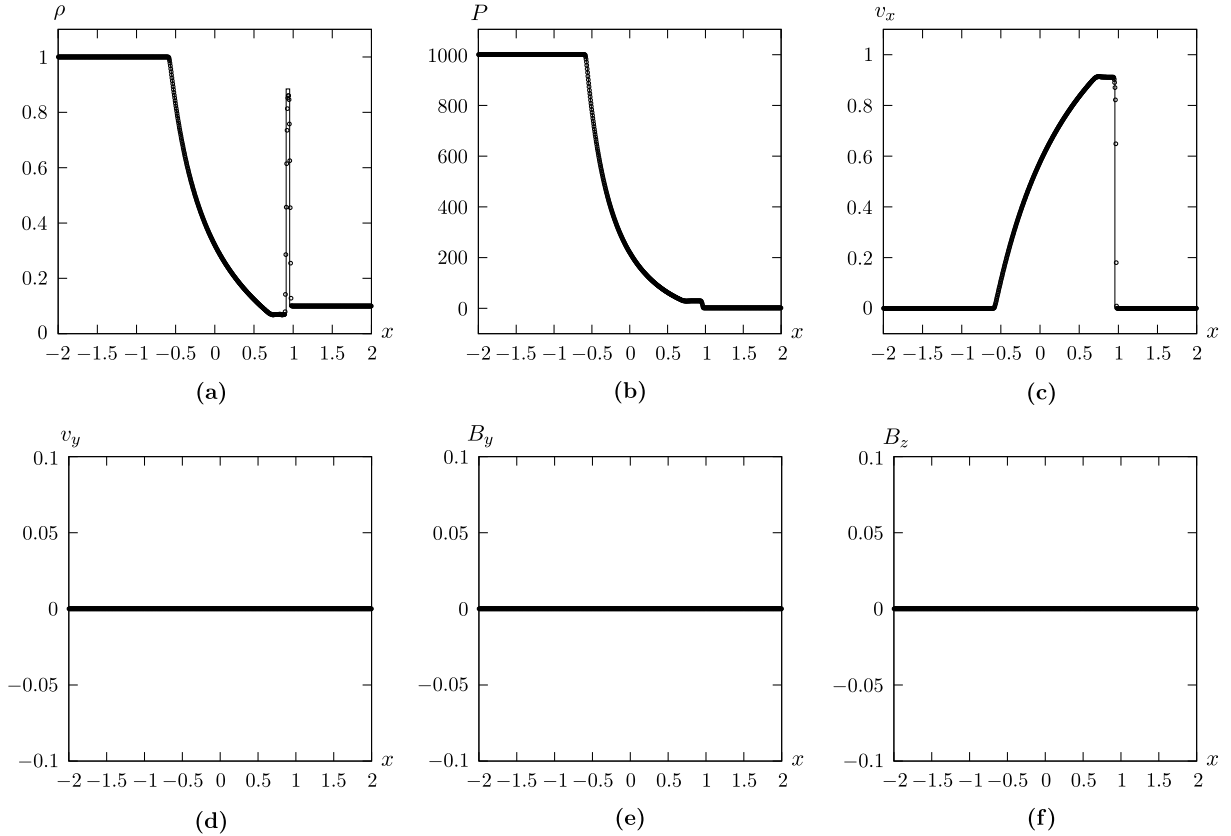


Рис. 1. Тест Коммиссарова № 1. Точное решение обозначено сплошной линией, численное решение обозначено кружками

Особенность теста состоит в сильном перепаде давления (три порядка) при постоянном продольном магнитном поле. Влево от контактного разрыва движется волна разрежения, а вправо скачок плотности. Заметим, что на численное решение свободно от артефактов на контактном разрыве и в основании волны разрежения, а также достаточно хорошо воспроизводит скачок плотности как в части местоположения, так и в амплитуде. Дополнительная сложность

такого скачка заключается в том, что его скорость движения существенно релятивистская и формирует ударную волну. Поперечные компоненты магнитного поля и скорости равны нулю и не изменяются в ходе эволюции. Также отметим, что диссипация ударной волны происходит всего на три ячейки, одна из которых отличается от точного решения менее чем на 10 процентов.

2.2. Тест Коммиссарова № 2

Будем рассматривать эволюцию замагниченного газа с показателем адиабаты $\gamma = 4/3$ на интервале $[-2; 2]$ до момента времени $t = 1.22$. В начальный момент времени параметры газа выбраны слева: $\rho^L = 1$ — плотность, $p^L = 1$ — давление, $v_x^L = 5/\sqrt{26}$, $v_y^L = 0$, $v_z^L = 0$ — компоненты скорости, $B_x^L = 10$, $B_y^L = 10$, $B_z^L = 0$ — компоненты магнитного поля, и справа: $\rho^R = 1$ — плотность, $p^R = 1$ — давление, $v_x^R = -5/\sqrt{26}$, $v_y^R = 0$, $v_z^R = 0$ — компоненты скорости, $B_x^R = 10$, $B_y^R = -10$, $B_z^R = 0$ — компоненты магнитного поля. На рис. 2 изображены результаты сравнения численного и аналитического решения.

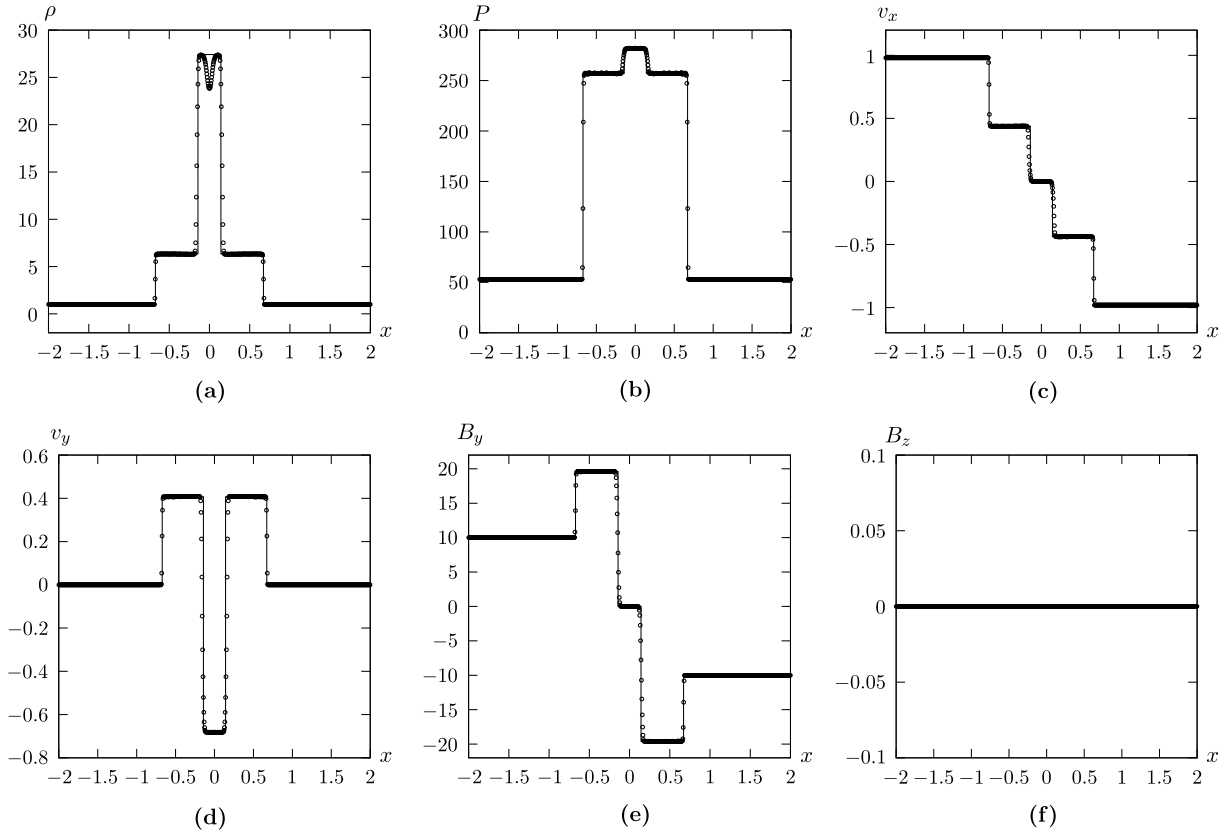


Рис. 2. Тест Коммиссарова № 2. Точное решение обозначено сплошной линией, численное решение обозначено кружками

Особенностью теста является столкновение потоков на скорости $v \simeq 0.98$. Эволюция газа погружена в магнитное поле с постоянной продольной и разрывной тангенциальной компонентой. Столкновение потоков провоцирует образование энтропийного следа в плотности в области начального разрыва. Медленные и быстрые магнитные волны расходятся в разные стороны с одинаковыми скоростями. Заметим, что в отличие от ряда численных методов [10] численный метод свободен от нефизичных осцилляций, что говорит в пользу разработанного метода. Диссипация на быстрой магнитной волне происходит всего на две ячейки.

2.3. Тест Бальзары № 1

Будем рассматривать эволюцию замагниченного газа с показателем адиабаты $\gamma = 2$ на интервале $[-0.5; 0.5]$ до момента времени $t = 0.4$. В начальный момент времени параметры газа выбраны слева: $\rho^L = 1$ — плотность, $p^L = 1$ — давление, $v_x^L = 0$, $v_y^L = 0$, $v_z^L = 0$ — компоненты скорости, $B_x^L = 0.5$, $B_y^L = 1$, $B_z^L = 0$ — компоненты магнитного поля, и справа: $\rho^R = 0.125$ — плотность, $p^R = 0.1$ — давление, $v_x^R = 0$, $v_y^R = 0$, $v_z^R = 0$ — компоненты скорости, $B_x^R = 0.5$, $B_y^R = -1$, $B_z^R = 0$ — компоненты магнитного поля. На рис. 3 изображены результаты сравнения численного и аналитического решения.

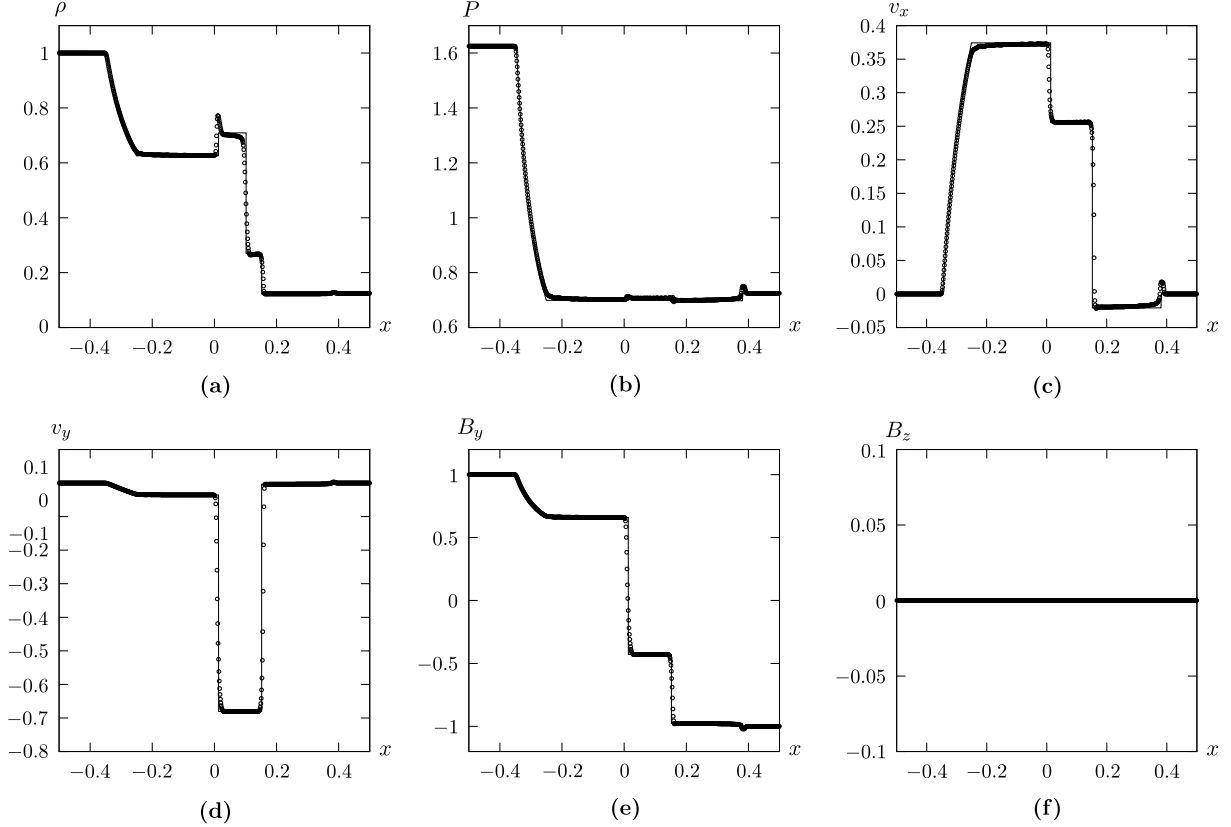


Рис. 3. Тест Бальзары № 1. Точное решение обозначено сплошной линией, численное решение обозначено кружками

Данный тест является расширением задачи Брио—Ву [15]. В основании контактного разрыва имеет место небольшой артефакт в виде осцилляции из-за отражения волн от медленной составной волны в области $x \sim 0.01$. Медленная составная волна возникает в области доминирования давления магнитного поля над давлением газа и, как следствие, происходит наложение волн. При этом в точном решении в этой области существует только одна волна [14]. В связи с таким наложением волн образуется особенность в виде пика плотности. Его амплитуда соответствует результатам, полученным с помощью других реализаций [10]. Контактный разрыв, ударная волна и правая быстрая магнитная волна воспроизведены без особенностей.

2.4. Тест Бальзары № 2

Будем рассматривать эволюцию замагниченного газа с показателем адиабаты $\gamma = 5/3$ на интервале $[-0.5; 0.5]$ до момента времени $t = 0.4$. В начальный момент времени параметры газа выбраны слева: $\rho^L = 1$ — плотность, $p^L = 30$ — давление, $v_x^L = 0$, $v_y^L = 0$, $v_z^L = 0$ — компоненты скорости, $B_x^L = 5$, $B_y^L = 6$, $B_z^L = 6$ — компоненты магнитного поля, и справа:

$\rho^R = 1$ — плотность, $p^R = 1$ — давление, $v_x^R = 0$, $v_y^R = 0$, $v_z^R = 0$ — компоненты скорости, $B_x^R = 5$, $B_y^R = 0.7$, $B_z^R = 0.7$ — компоненты магнитного поля. На рис. 4 изображены результаты сравнения численного и аналитического решения.

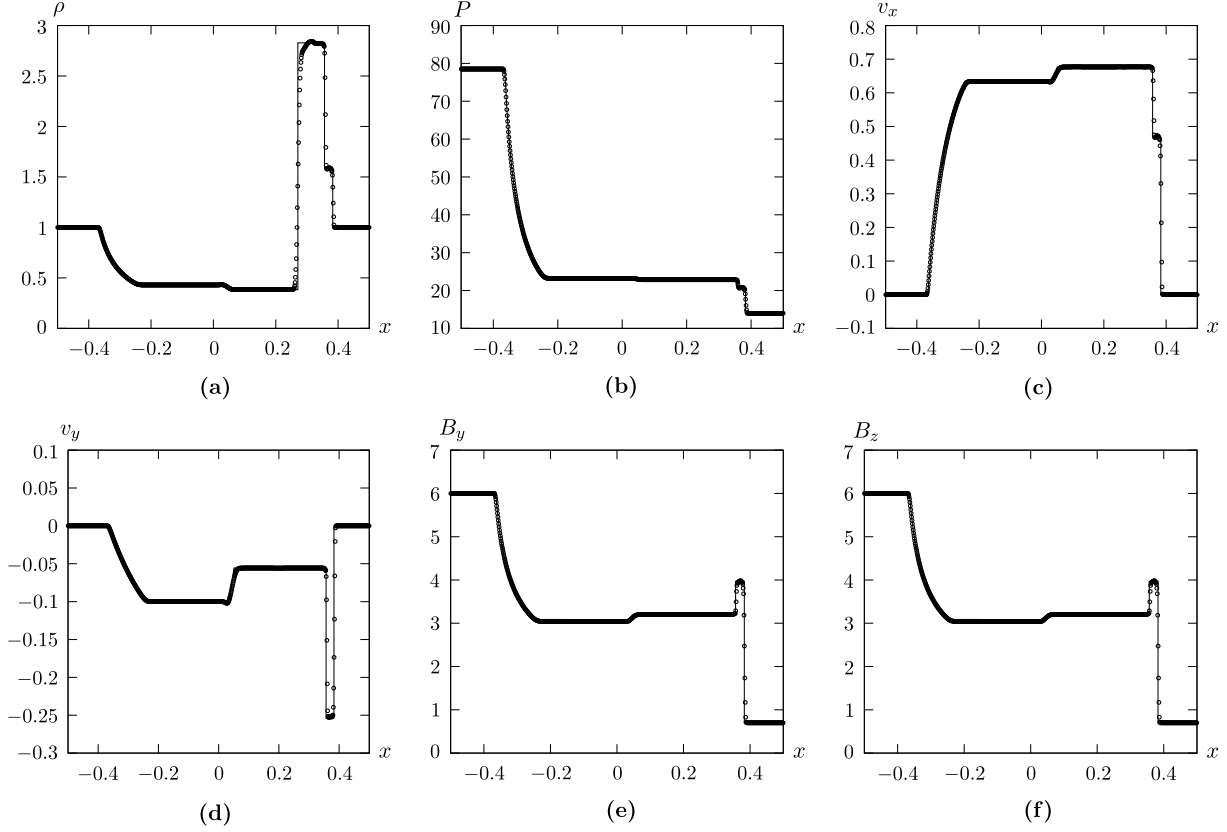


Рис. 4. Тест Бальзары № 2. Точное решение обозначено сплошной линией, численное решение обозначено кружками

Тест направлен на моделирование слабой ударной волны в статичном газе постоянной плотности с разрывом в давлении $p_L/p_R = 30$. Вблизи контактного разрыва формируется медленная магнитная волна, распространяющаяся вдоль оси x с Лоренц-фактором $\Gamma \sim 1.35$. Отметим, что метод достаточно хорошо и без особенностей воспроизвёл все компоненты решения. Диссипация на быстрой магнитной волне происходит на пять ячеек (трёх для функции плотности) из-за того, что волна достаточно слабая, а также из-за соседства с медленной волной, которая ”забирает на себя” часть диссипации численного решения.

2.5. Тест Бальзары № 3

Будем рассматривать эволюцию замагниченного газа с показателем адиабаты $\gamma = 5/3$ на интервале $[-0.5; 0.5]$ до момента времени $t = 0.4$. В начальный момент времени параметры газа выбраны слева: $\rho^L = 1$ — плотность, $p^L = 1000$ — давление, $v_x^L = 0$, $v_y^L = 0$, $v_z^L = 0$ — компоненты скорости, $B_x^L = 10$, $B_y^L = 7$, $B_z^L = 7$ — компоненты магнитного поля, и справа: $\rho^R = 1$ — плотность, $p^R = 0.1$ — давление, $v_x^R = 0$, $v_y^R = 0$, $v_z^R = 0$ — компоненты скорости, $B_x^R = 10$, $B_y^R = 0.7$, $B_z^R = 0.7$ — компоненты магнитного поля. На рис. 5 изображены результаты сравнения численного и аналитического решения.

Особенностью теста является формирование сильной ударной волны из-за начального скачка давления (на четыре порядка). Разрыв в магнитном поле осложняет задачу тем, что быстрые и медленные ударные волны распространяются близко друг к другу создавая ”тонкий” пик, воспроизводимый всего на пяти ячейках. Несмотря на ограничения расчётной сетки

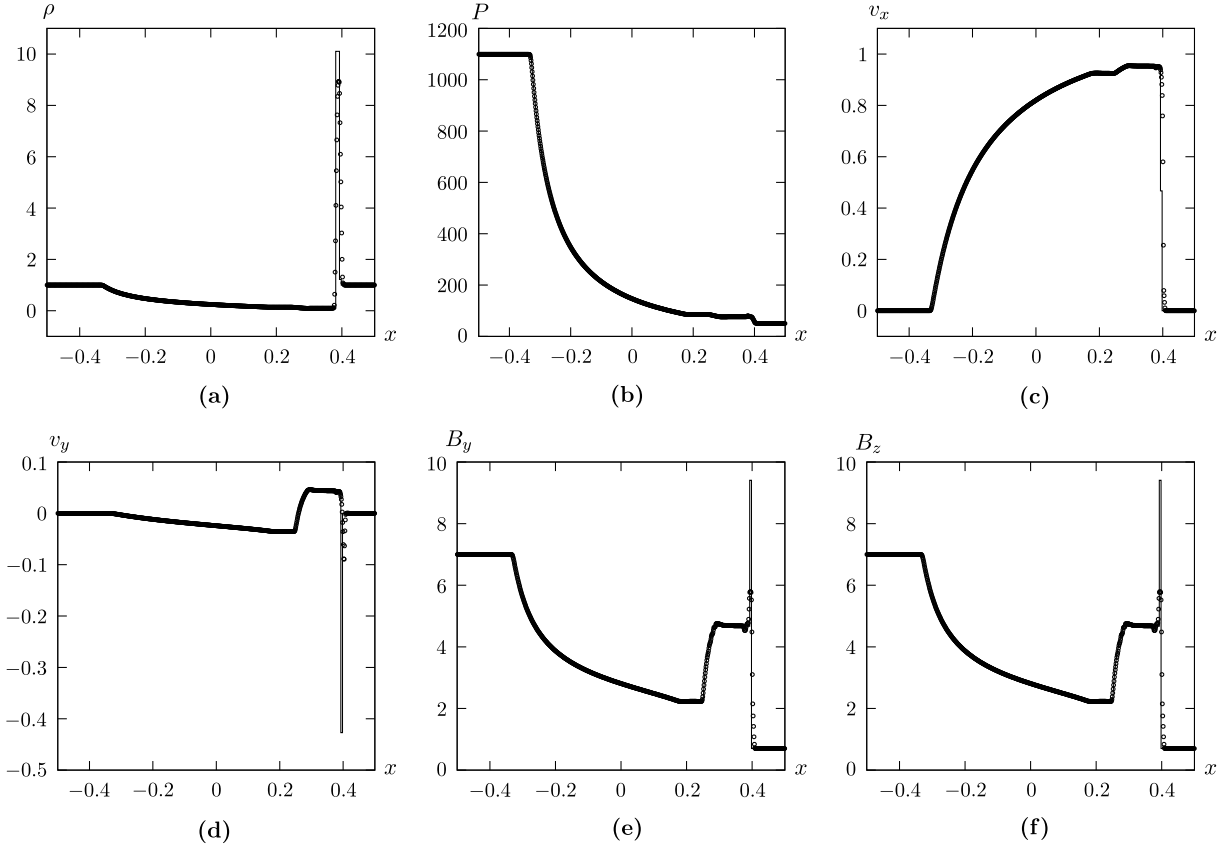


Рис. 5. Тест Бальзары № 3. Точное решение обозначено сплошной линией, численное решение обозначено кружками

численный метод воспроизвёл пик плотности как в части местоположения, так и в части амплитуды, а также воспроизвёл обратное течение по оси y , что видно на графике поперечной скорости v_y . Из литературы известно [10], что методы с кусочно-параболической реконструкцией не воспроизводят такое обратное течение даже при более подробной сетке. Использование кусочно-кубической реконструкции для воспроизведения обратного поперечного течения требует минимум 3200 ячеек, что в четыре раза больше, чем используется в настоящей работе.

2.6. Тест Бальзары № 4

Будем рассматривать эволюцию замагниченного газа с показателем адиабаты $\gamma = 5/3$ на интервале $[-0.5; 0.5]$ до момента времени $t = 0.4$. В начальный момент времени параметры газа выбраны слева: $\rho^L = 1$ — плотность, $p^L = 0.1$ — давление, $v_x^L = 0.999$, $v_y^L = 0$, $v_z^L = 0$ — компоненты скорости, $B_x^L = 10$, $B_y^L = 7$, $B_z^L = 7$ — компоненты магнитного поля, и справа: $\rho^R = 1$ — плотность, $p^R = 0.1$ — давление, $v_x^R = -0.999$, $v_y^R = 0$, $v_z^R = 0$ — компоненты скорости, $B_x^R = 10$, $B_y^R = -7$, $B_z^R = -7$ — компоненты магнитного поля. На рис. 6 изображены результаты сравнения численного и аналитического решения.

Тест посвящён столкновению газа на ультрарелятивистских скоростях при $\Gamma \sim 22$. Столкновение осложнено наличием высокого давления магнитного поля. Помимо быстрых магнитных волн можно увидеть две медленные магнитные волны, движущиеся в разные стороны. Для теста характерны паразитические колебания на ударной волне, что имеет место при использовании других методов [10].

По результатам проведённых одномерных тестов можно сказать, что разработанный численный метод успешно с ними справился. Особенности, полученные в численных решениях, аналогичны при использовании других методик. Метод подтвердил возможность получения

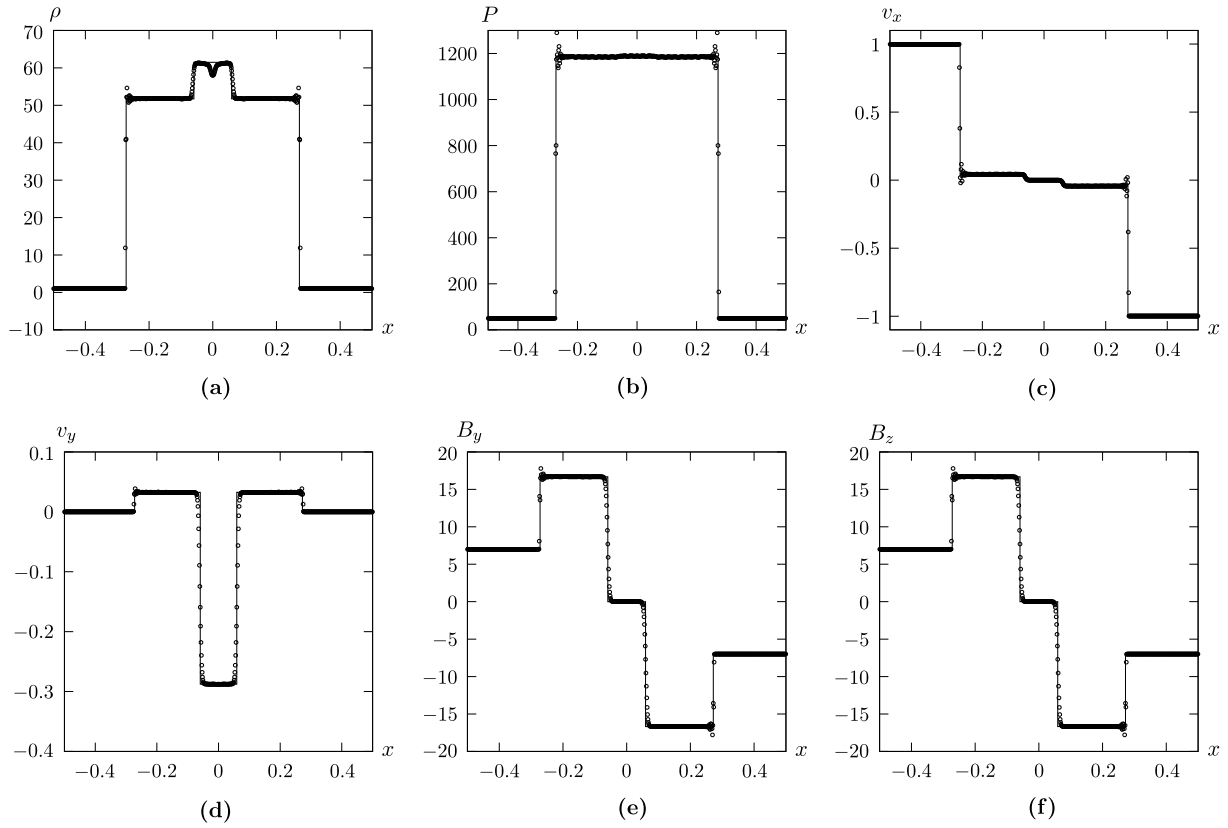


Рис. 6. Тест Бальзары № 4. Точное решение обозначено сплошной линией, численное решение обозначено кружками

численного решения с малой диссипацией, а также воспроизвёл формирование обратных течений при образовании сильных ударных волн.

3. ДИСКУССИЯ

В этом разделе приведём некоторые замечания по построенной численной схеме и перспективам её применения:

1. В статье использовано уравнение энергии в форме полной энергии. В то же время, используя эквивалентность энергии и массы, мы можем переписать выражение для энергии в виде $E = \rho h \Gamma^2 - p + \frac{B^2}{2} + \frac{v^2 B^2}{2} - \frac{(\vec{v}, \vec{B})^2}{2} - \rho \Gamma$. Такой вид используется, например, в работе [8] и эффективен при описании нерелятивистских холодных течений газа. Возможность использования уравнения энергии в двух видах имеет место и в модели специальной релятивистской гидродинамики. В работе [16] было показано, что выбор системы физических переменных и использование уравнения для энтропии позволяет корректно воспроизводить такую область в случае уравнений ньютоновской гидродинамики. По всей видимости такой подход может быть распространён на учёт релятивистских скоростей и магнитного поля.
2. Проблема вырождения гиперболичности уравнений специальной релятивистской магнитной гидродинамики требует привлечения аппарата формулировки уравнений в виде симметрической гиперболической системы. Такой подход сформулирован и развивается С. К. Годуновым и его коллегами для решения задач механики сплошной среды [17–19] в том числе и для уравнений специальной релятивистской магнитной гидродинамики [20, 21]. Условие положительной определённости системы эквивалентно условию

гиперболичности, что позволяет корректно построить численный метод с условиями его применимости.

3. В статье предложена кусочно-параболическая реконструкция физических переменных. Перспективным направлением развития кусочно-полиномиальной реконструкции будет увеличение порядка полинома для кубических функций. В работе [22] на основе WENO схемы предлагается алгоритм построения такой реконструкции.

Разумеется приведенные выше моменты являются дискуссионными, отражают только личную позицию автора и являются планом возможного развития предложенной в работе численной методики.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье представлен новый вариант схемы Русанова для решения уравнений специальной релятивистской магнитной гидродинамики на основе кусочно-параболического представления физических переменных для уменьшения диссипации численного метода. Проведена подробная верификация разработанной схемы на классических одномерных тестах.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-11-00014; <https://rscf.ru/project/23-11-00014/>). Других источников финансирования проведения или руководства данным конкретным исследованием не было.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ferrari A. Modeling extragalactic jets // *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* 1998. V. 36. P. 539–598.
2. Gabuzda D. C., Pushkarev A. B., Garnich N. N. Unusual radio properties of the BL Lac object 0820+225 // *Mon. Notices Royal Astron. Soc.* 2001. V. 327, N 1. P. 1–9.
3. Gabuzda D. C., Gomez J. L. VSOP polarization observations of the BL Lacertae object OJ 287 // *Mon. Notices Royal Astron. Soc.* 2001. V. 320, N 4. P. L49–L54.
4. Attridge J., Roberts D., Wardle J. Radio Jet-Ambient Medium Interactions on Parsec Scales in the Blazar 1055+018 // *Astrophys. J.* 1999. V. 518, N 2. P. L87–L90.
5. Krause M., Lohr A. The magnetic field along the jets of NGC 4258 // *Astron. Astrophys.* 2004. V. 420, N 1. P. 115–123.
6. Kigure H., Uchida Y., Nakamura M., Hirose S., Cameron R. Distribution of Faraday Rotation Measure in Jets from Active Galactic Nuclei. II. Prediction from Our Sweeping Magnetic Twist Model for the Wiggled Parts of Active Galactic Nucleus Jets and Tails // *Astrophys. J.* 2004. V. 608, N 1. P. 119–135.
7. Anton L., Miralles J., Marti J., Ibanez J., Aloy M., Mimica P. Relativistic magnetohydrodynamics: renormalized eigenvectors and full wave decomposition Riemann solver // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 2010. V. 188, N 1. P. 1–31.
8. Leismann T., Anton L., Aloy M., Mueller E., Marti J., Miralles J., Ibanez J. Relativistic MHD simulations of extragalactic jets // *Astron. Astrophys.* 2005. V. 436, N 2. P. 503–526.
9. Nunez-de la Rosa J., Munz C.-D. XTROEM-FV: a new code for computational astrophysics based on very high order finite-volume methods – II. Relativistic hydro- and magnetohydrodynamics // *Mon. Notices Royal Astron. Soc.* 2016. V. 460, N 1. P. 535–559.
10. Lora-Clavijo F., Cruz-Osorio A., Guzman F. CAFE: a new relativistic MHD code // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 2015. V. 218, N 2. Article 24.

11. *Kulikov I. M.* Using Piecewise Parabolic Reconstruction of Physical Variables in the Rusanov Solver. I. The Special Relativistic Hydrodynamics Equations // *J. Appl. Ind. Math.* 2023. V. 17, N 4. P. 737–749.
12. *Komissarov S. S.* A Godunov-type scheme for relativistic magnetohydrodynamics // *Mon. Notices Royal Astron. Soc.* 1999. V. 303, N 2. P. 343–366.
13. *Balsara D.* Total Variation Diminishing Scheme for Relativistic Magnetohydrodynamics // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 2001. V. 132, N 1. P. 83–101.
14. *Giacomazzo B., Rezzolla L.* The exact solution of the Riemann problem in relativistic magnetohydrodynamics // *J. Fluid Mech.* 2006. V. 562. P. 223–259.
15. *Brio M., Wu C.* An upwind differencing scheme for the equations of ideal magnetohydrodynamics // *J. Comput. Phys.* 1988. V. 75, N 2. P. 400–422.
16. *Kriksin Y. A., Tishkin V. F.* Variational Entropic Regularization of the Discontinuous Galerkin Method for Gasdynamic Equations // *Math. Models Comput. Simul.* 2019. V. 11, N 6. P. 1032–1040.
17. *Godunov S. K.* Thermodynamic formalization of the fluid dynamics equations for a charged dielectric in an electromagnetic field // *Comput. Math. Math. Phys.* 2012. V. 52, N 5. P. 787–799.
18. *Godunov S. K.* About inclusion of Maxwell's equations in systems relativistic of the invariant equations // *Comput. Math. Math. Phys.* 2013. V. 53, N 8. P. 1179–1182.
19. *Godunov S. K., Kulikov I. M.* Computation of discontinuous solutions of fluid dynamics equations with entropy nondecrease guarantee // *Comput. Math. Math. Phys.* 2014. V. 54, N 6. P. 1012–1024.
20. *Freistuehler H., Trakhinin Yu.* Symmetrizations of RMHD equations and stability of relativistic current-vortex sheets // *Class. Quantum Gravity.* 2013. V. 30, N 8. Article 085012.
21. *Trakhinin Yu.* Local Existence of Contact Discontinuities in Relativistic Magnetohydrodynamics // *Siberian Adv. Math.* 2020. V. 30, N 2. P. 55–76.
22. *Lee D., Faller H., Reyes A.* The Piecewise Cubic Method (PCM) for computational fluid dynamics // *J. Comput. Phys.* 2017. V. 341, N 1. P. 230–257.

UDC 519.4

USING PIECEWISE PARABOLIC RECONSTRUCTION OF PHYSICAL VARIABLES IN RUSANOV'S SOLVER. II. SPECIAL RELATIVISTIC MAGNETOHYDRODYNAMICS EQUATIONS

© 2024 I. M. Kulikov

*Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics, Siberian Branch,
Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 630090 Russia*

E-mail: kulikov@ssd.sccc.ru

Received 10.06.2023, revised 14.07.2023, accepted 07.02.2024

Abstract. Rusanov's scheme for solving hydrodynamic equations is one of the most robust in the class of Riemann solvers. It was previously shown that Rusanov's scheme based on piecewise parabolic reconstruction of primitive variables gives a low-dissipative scheme relevant to Roe and Harten–Lax–Van Leer solvers when using a similar reconstruction. Moreover, unlike these solvers, the numerical solution is free from artifacts. In the case of equations of special relativistic magnetohydrodynamics, the spectral decomposition for solving the Riemann problem is quite complex and does not have an analytical solution. The present paper proposes the development of Rusanov's scheme using a piecewise parabolic reconstruction of primitive variables to use in the equations of special relativistic magnetohydrodynamics. The developed scheme was verified using eight classical problems on the decay of an arbitrary discontinuity that describe the main features of relativistic magnetized flows.

Keywords: computational astrophysics, relativistic magnetohydrodynamics, numerical method, Rusanov solver, piecewise parabolic reconstruction.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.103

REFERENCES

1. A. Ferrari, "Modeling extragalactic jets," *Annu. Rev. Astron. Astrophys.* **36**, 539–598 (1998).
2. D. C. Gabuzda, A. B. Pushkarev, and N. N. Garnich, "Unusual radio properties of the BL Lac object 0820+225," *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **327** (1), 1–9 (2001).
3. D. C. Gabuzda and J. L. Gomez, "VSOP polarization observations of the BL Lacertae object OJ 287," *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **320** (4), L49–L54 (2001).
4. J. Attridge, D. Roberts, and J. Wardle, "Radio jet-ambient medium interactions on parsec scales in the Blazar 1055+018," *Astrophys. J.* **518** (2), L87–L90 (1999).
5. M. Krause and A. Lohr, "The magnetic field along the jets of NGC 4258," *Astron. Astrophys.* **420** (1), 115–123 (2004).
6. H. Kigure, Y. Uchida, M. Nakamura, S. Hirose, and R. Cameron, "Distribution of Faraday rotation measure in jets from active galactic nuclei. II. Prediction from our sweeping magnetic twist model for the wiggled parts of active galactic nucleus jets and tails," *Astrophys. J.* **608** (1), 119–135 (2004).
7. L. Anton, J. Miralles, J. Marti, J. Ibanez, M. Aloy, and P. Mimica, "Relativistic magnetohydrodynamics: renormalized eigenvectors and full wave decomposition Riemann solver," *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **188** (1), 1–31 (2010).
8. T. Leismann, L. Anton, M. Aloy, E. Mueller, J. Marti, J. Miralles, and J. Ibanez, "Relativistic MHD simulations of extragalactic jets," *Astron. Astrophys.* **436** (2), 503–526 (2005).

9. J. Nunez-de la Rosa and C.-D. Munz, “XTROEM-FV: A new code for computational astrophysics based on very high order finite-volume methods — II. Relativistic hydro- and magnetohydrodynamics,” *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **460** (1), 535–559 (2016).
10. F. Lora-Clavijo, A. Cruz-Osorio, and F. Guzman, “CAFE: A new relativistic MHD code,” *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **218** (2), 24 (2015).
11. I. M. Kulikov, “Using piecewise parabolic reconstruction of physical variables in the Rusanov solver. I. The special relativistic hydrodynamics equations,” *J. Appl. Ind. Math.* **17** (4), 737–749 (2023).
12. S. S. Komissarov, “A Godunov-type scheme for relativistic magnetohydrodynamics,” *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **303** (2), 343–366 (1999).
13. D. Balsara, “Total variation diminishing scheme for relativistic magnetohydrodynamics,” *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **132** (1), 83–101 (2001).
14. B. Giacomazzo and L. Rezzolla, “The exact solution of the Riemann problem in relativistic magnetohydrodynamics,” *J. Fluid Mech.* **562**, 223–259 (2006).
15. M. Brio and C. Wu, “An upwind differencing scheme for the equations of ideal magnetohydrodynamics,” *J. Comput. Phys.* **75** (2), 400–422 (1988).
16. Y. A. Kriksin and V. F. Tishkin, “Variational entropic regularization of the discontinuous Galerkin method for gasdynamic equations,” *Math. Models Comput. Simul.* **11** (6), 1032–1040 (2019).
17. S. K. Godunov, “Thermodynamic formalization of the fluid dynamics equations for a charged dielectric in an electromagnetic field,” *Comput. Math. Math. Phys.* **52** (5), 787–799 (2012).
18. S. K. Godunov, “About inclusion of Maxwell’s equations in systems relativistic of the invariant equations,” *Comput. Math. Math. Phys.* **53** (8), 1179–1182 (2013).
19. S. K. Godunov and I. M. Kulikov, “Computation of discontinuous solutions of fluid dynamics equations with entropy nondecrease guarantee,” *Comput. Math. Math. Phys.* **54** (6), 1012–1024 (2014).
20. H. Freistuehler and Yu. Trakhinin, “Symmetrizations of RMHD equations and stability of relativistic current-vortex sheets,” *Class. Quantum Gravity* **30** (8), 085012 (2013).
21. Yu. Trakhinin, “Local existence of contact discontinuities in relativistic magnetohydrodynamics,” *Sib. Adv. Math.* **30** (2), 55–76 (2020).
22. D. Lee, H. Faller, and A. Reyes, “The Piecewise Cubic Method (PCM) for computational fluid dynamics,” *J. Comput. Phys.* **341** (1), 230–257 (2017).

УДК 519.63

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИНАМИКИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ТОКА ЭЛЕКТРОННОГО ПУЧКА В ВОЛЬФРАМОВОЙ ПЛАСТИНКЕ И ТОНКОМ СЛОЕ ЕГО ПАРОВ ПРИ ИМПУЛЬСНОМ НАГРЕВЕ С УЧЁТОМ ЭЛЕКТРОДВИЖУЩЕЙ СИЛЫ

© 2024 Г. Г. Лазарева^a, В. А. Попов^b, В. А. Окишев^c

*Российский университет дружбы народов,
ул. Миклухо–Маклая, 6, г. Москва 117198, Россия*

E-mails: ^alazareva-gg@rudn.ru, ^bv.a.popov94@gmail.com, ^cokishev-va@rudn.ru

Поступила в редакцию 26.04.2023 г.; после доработки 05.05.2023 г.;
принята к публикации 07.06.2023 г.

В работе впервые представлена новая модель распределения тока в образце вольфрама и испаряемом веществе при нагреве поверхности электронным пучком. Модель основана на решении уравнений электродинамики в цилиндрической системе координат с использованием модельного распределения температуры в образце и тонком слое испаряемого вольфрама. Проведён анализ модели в упрощённой постановке при постоянных значениях электрического сопротивления и термоэдс в газе и металле. Показана зависимость амплитуды и изолиний термотоков от распределения температуры на поверхности образца. Параметры модели взяты из экспериментов на стенде Beam of Electrons for materials Test Applications (BETA), созданного в ИЯФ СО РАН.

Ключевые слова: математическое моделирование, термотоки, вольфрам, импульсный нагрев, метод верхней релаксации, стенд BETA, материал дивертора.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.104

ВВЕДЕНИЕ

На экспериментальном стенде Beam of Electrons for materials Test Applications (BETA), созданного в ИЯФ СО РАН [1], получены новые экспериментальные данные об эрозии поверхности вольфрамового образца при импульсном воздействии электронным пучком. Натурный эксперимент постоянно сопровождается численным [2]. Работа посвящена расчёту тока в образце, который рассматривается как возможный источник вращения вещества, который наблюдается в эксперименте. Влияние на возникновение тока оказывает разность электрического сопротивления и термоэдс в металле и его парах. В областях с перепадами параметров возникает электродвижущая сила. Важно, что в газе и в расплаве электродвижущая сила отличается. Поэтому возникает ненулевое ускоряющее напряжение на замкнутом контуре через газ и расплав, которое порождает ток по этому контуру. Без использования математического моделирования сложно предсказать, в каких областях может наблюдаться наибольший ток. Ток, взаимодействуя с магнитным полем, приводит к движению вещества в целом. Модель нагрева вольфрама основана на решении в области образца уравнений электродинамики [3]. Рассматривается случай, когда уравнения на поля и токи выписаны для образца вольфрама в цилиндрической системе координат с учётом электродвижущих сил, возникающих в газе над образцом [4]. Предполагается, что характерное время изменения велико по сравнению с временем установления равновесия уравнений электродинамики на масштабе задачи. Развитие модели предполагает уточнение расчёта удельной электропроводности газа и термоэдс. Планируется введение зависимости этих величин от температуры в металле, расплаве и газе.

В дальнейшем предполагается включение учёта зависимости этих параметров от плотности газа, получаемой из решения системы уравнений для теплопроводного газа. В таком случае можно дать оценки, в каких областях газа и расплава будет хорошая проводимость и высокое напряжение. На текущем этапе исследований процесс испарения вольфрама рассматривается без цепочки фазовых переходов «твёрдое состояние — жидкость — газ». Формулировка уравнения состояния от металла до газового состояния предложено в [5].

Процесс импульсного нагрева в течении долгого времени исследуется и используется в промышленности для лазерного спекания порошков, лазерной и электронной сварки [6]. Физические процессы, сопровождающие импульсный нагрев для целей производства материалов, сильно отличаются от моделируемых в этой работе. В представленной задаче мощности и длительности потока энергии существенно избыточны для промышленного применения. Например, наносекундный лазер не создаёт газового облака в процессе облучения, поскольку характерная дистанция разлёта паров будет порядка 1 мкм.

Постановка задачи и математическая модель являются новыми и представлены впервые. Практическая направленность работы требует, чтобы постановка модельной задачи как можно точно соответствовала условиям эксперимента. Результаты расчётов итоговой модели будут использоваться для сравнения с экспериментальными данными, полученными на экспериментальном стенде ВЕТА в ИЯФ СО РАН.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В экспериментах на установке ВЕТА образцы прокатанного вольфрама подвергались воздействию осесимметричного электронного пучка [7]. Электроны с энергией 80-90 кэВ нагревают материал в слое, который является тонким по сравнению с характерной глубиной нагрева материала. Тепло, поглощённое поверхностью, распространяется в материал. Образец имеет размеры 25 мм x 25 мм и типичную толщину 4 мм. Поскольку за такое короткое время образец нагревается на глубину нескольких сотен микрон, область моделирования представляла собой поперечное сечение образца (толщина образца 3 мм) и тонкого слоя паров (толщина слоя 3 мм): область 12 мм x 6 мм (см. рис. 1). Численная модель распределения тока пучка в нагреваемом образце и в парах вольфрама в упрощённом виде сводится к решению системы уравнений Максвелла.

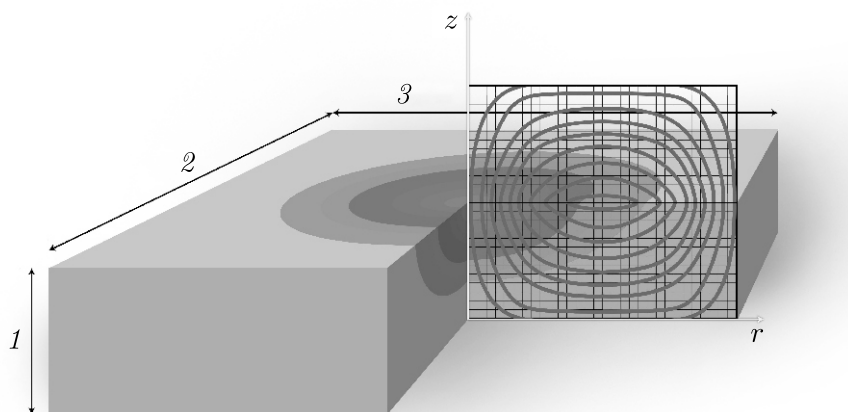


Рис. 1. Схема эксперимента: 1 — 3 мм, 2 — 25 мм, 3 — 25 мм

Процесс распространения тока можно считать стационарным, так как характерное время изменения велико по сравнению со временем установления равновесия уравнений электродинамики на масштабе задачи [8]. Учёт процесса испарения гарантирует ограничение роста

температуры в образце, что соответствует экспериментальным данным [2]. Система уравнений Максвелла для расчёта тока в образце модифицирована для стационарного случая в цилиндрической системе координат.

$$\begin{aligned}\nabla \times \vec{B} &= \frac{4\pi}{C} \vec{j}, \\ \nabla \times \vec{E} &= 0, \quad \nabla \cdot \vec{B} = 0, \\ \nabla \cdot \vec{j} &= 0, \quad \vec{E} = \rho_e \vec{j},\end{aligned}\tag{1}$$

где ρ_e — удельное сопротивление, $\vec{B}$ — векторное магнитное поле, $\vec{E} = (E_r, E_\phi, E_z)$ — векторное электрическое поле, $\vec{j} = (j_r, j_\phi, j_z)$ — ток.

Введём векторный потенциал тока $F = (F_r, F_\phi, F_z)$:

$$\vec{j} = \nabla \times \vec{F}\tag{2}$$

и запишем систему уравнений (1) в цилиндрической системе координат (r, ϕ, z) . Заметим, что производные по углу ϕ будут равны нулю в силу симметрии задачи относительно поворота [9, 10]. Выразим ток через векторный потенциал тока, учитывая нулевую производную по углу. Так как отсутствует вихревое электрическое поле, то ток течёт только по осевому и радиальному направлениям, и $E_\phi = 0$. Отсюда следует, что $j_\phi = 0$:

$$\vec{j} = \begin{pmatrix} j_r \\ j_\phi \\ j_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial F_\phi}{\partial \phi} \\ \frac{\partial F_r}{\partial z} - \frac{\partial F_z}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial F_\phi}{\partial r} - \frac{1}{r} \frac{\partial F_r}{\partial \phi} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{\partial F_\phi}{\partial z} \\ 0 \\ \frac{1}{r} \frac{\partial F_\phi}{\partial r} \end{pmatrix}.$$

Таким образом, для описания тока достаточно только одной функции F_ϕ , описывающей "завихрённость" тока. С учётом нулевой производной по углу ϕ и отсутствия вихревого электрического поля $j_\phi = 0$ из обобщённого закона Ома

$$\vec{j} = (\vec{E} - S \nabla T - \nabla \mu / e) / \rho_e.\tag{3}$$

Получено уравнение на "завихрённость" для одной нетривиальной компоненты. Здесь μ химический потенциал электронов, S — термоэдс и e заряд электрона. Для этого к левой и правой частям уравнения (2) применён векторный оператор rot :

$$\nabla \times (\rho_e \vec{j}) = \nabla \times (\vec{E} - S \nabla T - \nabla \mu / e) = \nabla S \times \nabla T.$$

В силу потенциальности электрического поля и химического потенциала выражение сильно упрощается. Аналогично ранее рассмотренному случаю для термотоков в образце [3] для (2) получено:

$$\frac{\partial^2 F_\phi}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 F_\phi}{\partial z^2} + \frac{\partial F_\phi}{\partial r} \left(\frac{1}{\rho_e} \frac{\partial \rho_e}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) + \frac{\partial F_\phi}{\partial z} \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial \rho_e}{\partial z} + F_\phi \left(\frac{1}{r \rho_e} \frac{\partial \rho_e}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \right) = \frac{1}{\rho_e} \left(\frac{\partial S}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{\partial S}{\partial z} \frac{\partial T}{\partial r} \right).$$

После введения полного тока $I(r, z) = 2\pi r F_\phi$ уравнение принимает вид:

$$\frac{\partial^2 I}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 I}{\partial z^2} + \frac{\partial I}{\partial r} \frac{\partial \ln(\rho_e/r)}{\partial r} + \frac{\partial I}{\partial z} \frac{\partial \ln(\rho_e/r)}{\partial z} = \frac{2\pi r}{\rho_e} \left(\frac{\partial S}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{\partial S}{\partial z} \frac{\partial T}{\partial r} \right).\tag{4}$$

Обозначив $\Phi = \ln(\rho_e/r)$ для ∇ — оператора дифференцирования в ортогональной системе координат (r, z) , можно записать задачу в виде:

$$\begin{aligned}\rho_e \nabla^2 I + \rho_e \nabla I \nabla \Phi &= 2\pi r \nabla S \nabla T, \quad 0 < r < r_{\max}, \quad 0 < z < z_{\max}, \\ \Phi &= \ln(\rho_e/r), \quad I|_{t=0} = 0, \quad I|_{(0,z)} = 0, \\ \frac{\partial I}{\partial n} \Big|_{(r_{\max}, z)} &= 0, \quad \frac{\partial I}{\partial n} \Big|_{(r, z_{\max})} = 0, \quad I|_{(r, 0)} = 0.\end{aligned}\tag{5}$$

Характерные значения параметров приведены в таблице.

Параметр	Характерное значение	Размерность	Описание параметров
r_0	1	мм	Характерный радиус
t_0	10^2	мкс	Характерное время
T_0	10^3	К	Температура
W_0	10^3	Вт/мм ²	Удельный поток энергии
I_0	10^3	А	Ток
j_0	10^3	А/мм ²	Плотность тока
S_0	10^{-2}	Вт/К	Термоэдс
ρ_{e0}	10^{-2}	Ом · мм	Удельное сопротивление

Рассмотрим задачу (5) для случая, когда ρ_e, S постоянны в металле и в газе. В качестве значений выберем значения близкие к данным для температуры 6000 К:

$$\rho_e^{met} = 1.5 \cdot 10^{-4} \text{ Ом} \cdot \text{мм}, \quad \rho_e^{gas} = 0.7 \cdot 10^{-3} \text{ Ом} \cdot \text{мм}, \quad S^{met} = 1.5 \cdot 10^{-5} \frac{\text{Вт}}{\text{К}}, \quad S^{gas} = 10^{-3} \frac{\text{Вт}}{\text{К}}.$$

В таком случае уравнение (4) упрощается, так как ρ_e, S постоянны во всей расчётной области за исключением границы раздела сред. В уравнении остаются два члена, зависящих от ρ_e, S :

$$\frac{\partial^2 I}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 I}{\partial z^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial I}{\partial r} + \frac{\partial I}{\partial z} \frac{1}{\rho_e} \frac{\partial \rho_e}{\partial z} + \frac{2\pi r}{\rho_e} \frac{\partial S}{\partial z} \frac{\partial T}{\partial r} = 0.$$

Заметим, что последние два слагаемых не равны нулю только на поверхности металла. Таким образом, задача сводится к формированию возмущения на прямой линии $z = z_0$ внутри области и картины его распространения в подобласти, соответствующие металлу и газу. В рассматриваемой постановке задачи выявляется такая особенность модели, как необходимость определять амплитуду тока через производную функций сопротивления и термоэдс в точке разрыва. При расчёте токов без учёта испаряющегося газа [3] граничные условия являлись определяющей характеристикой для определения токов. В начально-краевой задаче (5) решение определяется правой частью уравнения, так как рассматриваемая область содержит источники тока за счёт учёта термоэмиссии. Однородные граничные условия для тока в образце и газе над образцом упрощают проведение численных расчётов. Безусловно, такой выбор граничных условий является не точным. Но точность такого приближения можно повысить, увеличивая расчётную область. Это не противоречит постановке задачи, так как в моделируемом эксперименте образец закреплён в установке большого внутреннего диаметра (10 см), заполненной техническим вакуумом. Постановка задачи (5) позволяет не определять ток на границе испаряемого газа. На первый план выходит расчёт термоэмиссии.

2. МЕТОД РЕШЕНИЯ

Задача только в области образца была решена ранее [3]. Решить задачу только в области паров в настоящее время невозможно, так как постановка граничных условия для термотокров в газе над поверхностью металла вызывает большие трудности. В рассматриваемой постановке проблема постановки граничных условий снята, но возникает ряд сложностей. Амплитуду тока нельзя определить точно для непрерывной задачи с любой степенью упрощения, так как производные в точке разрыва принимают бесконечное значение. Без регуляризации нельзя приступать к численному решению задачи, так как можно получить решение, зависящее от шага h расчётной сетки. Для использования схем сплошного счёта учёт условий на границе между материалом пластинки и парами необходимо преобразовать уравнение (5). В слагаемом

$\frac{\partial I}{\partial z} \frac{\partial \ln(\rho_e/r)}{\partial z}$ оба множителя терпят разрыв на поверхности образца. Производная тока по нормали к поверхности меняет знак, так как на границе металл-газ токи имеют максимум. При этом решение уравнения (5) имеет положительные вторые производные всюду вне поверхности образца. Производная по нормали к поверхности удельной проводимости — это производная от разрывной функции, так как удельная проводимость металла на два порядка выше проводимости газа, не зависимо от способа её определения. Аналогично, слагаемое $\frac{\partial S}{\partial z} \frac{\partial T}{\partial r}$ в правой части уравнения (5) содержит производную от разрывной функции термоэдс. Производные по z от разрывных функций вычисляются с использованием дельта-функции Дирака, которая для случая разрывных коэффициентов на границе сред реализуется [11] следующим образом:

$$\delta_h(z - z_0) = \frac{1}{h} f\left(\frac{z - z_0}{h}\right), \quad f\left(\frac{z - z_0}{h}\right) = \begin{cases} \frac{1}{4} \left(1 + \cos\left(\pi \frac{z - z_0}{2h}\right)\right), & \left|\frac{z - z_0}{h}\right| \leq 2, \\ 0, & \left|\frac{z - z_0}{h}\right| > 2. \end{cases}$$

Предложенная [11] замена производной в точке разрыва на непрерывную функцию $\delta(z - z_0)$, умноженную на число, равное скачку термоэдс на промежутке $[z_0 - 2h, z_0 + 2h]$ адаптирована к рассматриваемой задаче. После регуляризации правой части уравнение (5) принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 I}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 I}{\partial z^2} + \frac{\partial I}{\partial r} \frac{\partial \ln(\rho_e/r)}{\partial r} + \frac{\partial I}{\partial z} \frac{\partial \ln(\rho_e/r)}{\partial z} = \\ = \frac{2\pi r}{\rho_e} \left(\frac{\partial S}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{\partial T}{\partial r} \left\{ \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right)_{z \neq z_0} + \delta(z - z_0)[S]_{z=z_0} \right\} \right). \end{aligned}$$

Так как производная $\frac{\partial I}{\partial z}$ терпит разрыв в точке максимума функции I на границе раздела сред, слагаемое $\frac{\partial I}{\partial z} \frac{\partial \ln(\rho_e/r)}{\partial z}$ требует сглаживания $\frac{\partial \ln(\rho_e/r)}{\partial z}$. Использование дельта-функции в этом случае недостаточно. Это слагаемое следует преобразовать следующим образом:

$$\frac{\partial I}{\partial z} \frac{\partial \ln(\rho_e/r)}{\partial z} = \frac{\partial I}{\partial z} \left(\left\{ \frac{\partial (\ln(\rho_e/r))}{\partial z} \right\}_{z \leq z_0 - \varepsilon, z \geq z_0 + \varepsilon} + \left\{ \frac{\partial P(\rho_e/r)}{\partial z} \right\}_{z_0 - \varepsilon < z < z_0 + \varepsilon} \right).$$

Здесь $P(\rho_e/r)$ — кубический полином такой, что $\left(\frac{\partial^2 P(\rho_e/r)}{\partial z^2} \right)_{z=z_0 \pm \varepsilon} = \left(\frac{\partial^2 \ln(\rho_e/r)}{\partial z^2} \right)_{z=z_0 \pm \varepsilon}$. В рассматриваемом случае постоянных параметров среды для сглаживания достаточно использовать сигмоиду вида $P(\rho_e/r) = \ln(\rho_e^{met}/r) \frac{1}{1 - e^{z-z_0}} + \ln(\rho_e^{gas}/r)$, $\varepsilon = 0.05$ мм. Тогда в результате такого сглаживания можно получить уравнение, дающее адекватное решение на границе раздела сред:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 I}{\partial r^2} + \frac{\partial^2 I}{\partial z^2} + \frac{\partial I}{\partial r} \frac{\partial \ln(\rho_e/r)}{\partial r} + \frac{\partial I}{\partial z} \left\{ \frac{\partial (\ln(\rho_e/r))}{\partial z} \right\}_{z \leq z_0 - \varepsilon, z \geq z_0 + \varepsilon} + \frac{\partial I}{\partial z} \left\{ \frac{\partial P(\rho_e/r)}{\partial z} \right\}_{z_0 - \varepsilon < z < z_0 + \varepsilon} = \\ = \frac{2\pi r}{\rho_e} \left(\frac{\partial S}{\partial r} \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{\partial T}{\partial r} \left\{ \frac{\partial S}{\partial z} \right\}_{z \neq z_0} - \frac{\partial T}{\partial r} \delta(z - z_0)[S]_{z=z_0} \right). \end{aligned} \quad (6)$$

Такая регуляризация будет служить отправной точкой для дальнейших методических исследований. Результаты расчётов подтверждают, что в случае увеличения разрыва между удельным сопротивлением в металле и в газе амплитуда тока возрастает. Для решения полной системы уравнений Максвелла (5) в многомерном случае известны [12, 13] численные методы решения задач электродинамики с учётом нелинейных эффектов, приводящих к значительному изменению характеристик электромагнитного поля. Для решения упрощённого варианта системы (5) вида (6) можно использовать как хорошо изученные итерационные методы [14, 15],

конечно-элементные и конечно-объёмные методы [16, 17], так и готовые библиотеки [18]. В дальнейшем планируется использовать для решения задачи обобщённый метод минимальных остатков (GMRES) [19]. Решение уравнения (3) методом верхней релаксации [20] на каждом шаге по времени позволяет построить экономичный алгоритм при параметре релаксации [21]. Увеличим расчётную область в два раза по осевому направлению. Зададим на сетке с узлами $r_i = ih$, $i = 1, \dots, N_r$, $z_k = kh$, $k = 1, \dots, 2N_z$ сеточные функции $T_{ik} = T(r_i, z_k)$, $I_{ik}^n = (I(r_i, z_k))^n$. На этом этапе решается стационарная задача, используется значение $T_{ik} = T_{ik}^n$ на заданном шаге по времени, на котором достигаются достаточно высокие значения температуры. Пусть сеточные функции, лежащие на прямой $z = z_0$, имеют индексы (i, k_0) . Тогда конечно-разностная схема для системы уравнений (6) имеет вид:

$$\begin{aligned}
 ar_{i,k} &= \frac{1}{4} \left(\ln(\rho_e/r)_{i+1,k}^n - \ln(\rho_e/r)_{i-1,k}^n \right), \\
 az_{i,k} &= \frac{1}{4} \left\{ \ln(\rho_e/r)_{i,k+1}^n - \ln(\rho_e/r)_{i,k-1}^{n+1} \right\}_{k < k_0-l, k > k_0+l} + \\
 &\quad + \frac{1}{4} \left\{ P(\rho_e/r)_{i,k+1}^n - P(\rho_e/r)_{i,k-1}^{n+1} \right\}_{k_0-l \leq k \leq k_0+l}, \\
 F_{i,k}^n &= \frac{1}{4} \frac{2\pi r_i}{\rho_e(T_{i,k})} \left((S(T_{i+1,k}) - S(T_{i-1,k})) (T_{i,k+1} - T_{i,k-1}) - \right. \\
 &\quad \left. - (T_{i+1,k} - T_{i-1,k}) (S(T_{i,k+1}) - S(T_{i,k-1})) \right)_{k < k_0-2, k > k_0+2} - \\
 &\quad - h (T_{i+1,k} - T_{i-1,k}) \left(1 + \cos \left(\pi \frac{k - k_0}{2} \right) \right) (S(T_{i,k_0+1}) - S(T_{i,k_0}))_{k_0-2 \leq k \leq k_0+2}, \\
 I_{i,k}^{n+1} &= (1 - \omega) I_{i,k}^n + \frac{\omega}{4} \left[I_{i-1,k}^{n+1} (1 - ar_{i,k}) + I_{i,k-1}^{n+1} (1 - az_{i,k}) + \right. \\
 &\quad \left. + I_{i+1,k}^n (1 + ar_{i,k}) + I_{i,k+1}^n (1 + az_{i,k}) - F_{i,k}^n \right], \quad i = 2, \dots, N_r - 1, \quad k = 2, \dots, 2N_z - 1, \\
 I_{i,1} &= I_{1,k} = 0, \quad I_{i,2N_z} = I_{i,2N_z-1}, \quad I_{N_r,k} = I_{N_r-1,k}.
 \end{aligned} \tag{7}$$

Наряду с другими преимуществами, метод верхней релаксации интересен удобством использования в цилиндрических координатах. Принцип выражения искомого элемента через соседние по схеме точек вида «крест» универсально и не зависит от выбора системы координат. Можно заметить, что задача (5) и схема (7) содержит деление на радиус только в аргументе функции логарифма в расчёте коэффициента $\Phi_{i,j}$. Так как функция логарифма при росте аргумента возрастает довольно медленно, то деление на величины порядка $h/2$ при расчётах в окрестности оси симметрии не приводит к возникновению особенностей решения.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЁТОВ

Для анализа и валидации представленной модели рассмотрена упрощённая постановка. Аксиально-симметричная постановка задачи не предполагает сведение к одномерному случаю даже при постоянной по радиусу температуре на поверхности образца. Поэтому расчёты проводились для постоянных параметров материала и модельного распределения температуры, различных в металле и парах над образцом. Использовано модельное распределение температуры испаряемого вольфрама в рассматриваемом тонком слое паров 3 мм над образцом, повторяющее температуру поверхности. В образце нагрев вглубь металла на 0.5 мм задаётся линейно, что соответствует расчётам температуры в образце на основе решения задачи Стефана. На поверхности пластинки заданы три типа радиального распределения (рис. 2(a)): линейное, нормальное и расчётное. Расчётное распределение температуры, полученное в результате решения задачи Стефана с нелинейными коэффициентами и краевым условием на поверхности нагрева, даёт график 3 решения с особенностями (рис. 2(b)). Основной вклад в вид решения вносит коэффициент теплопроводности, который входит в граничное условие и

под знак производных по пространству [22]. При этом зависимость коэффициента теплопроводности терпит разрыв в точке плавления и имеет разный характер в металле и расплаве. Распределения температуры на поверхности, а значит и в образце и парах, имеют близкие значения. Тем не менее, полученные амплитуды термотока (рис. 2(b)) существенно различаются. Это обусловлено тем, что радиальная производная температуры входит в правую часть уравнения (4). Следовательно, особенности распределения температуры задают ток. Сильный эффект усиления амплитуды тока наблюдается в результате учёта неоднородности расчётного распределения температуры, которое обусловлено влиянием свободной границы расплав-металл. Такие особенности полученного решения согласуются с физикой процесса.

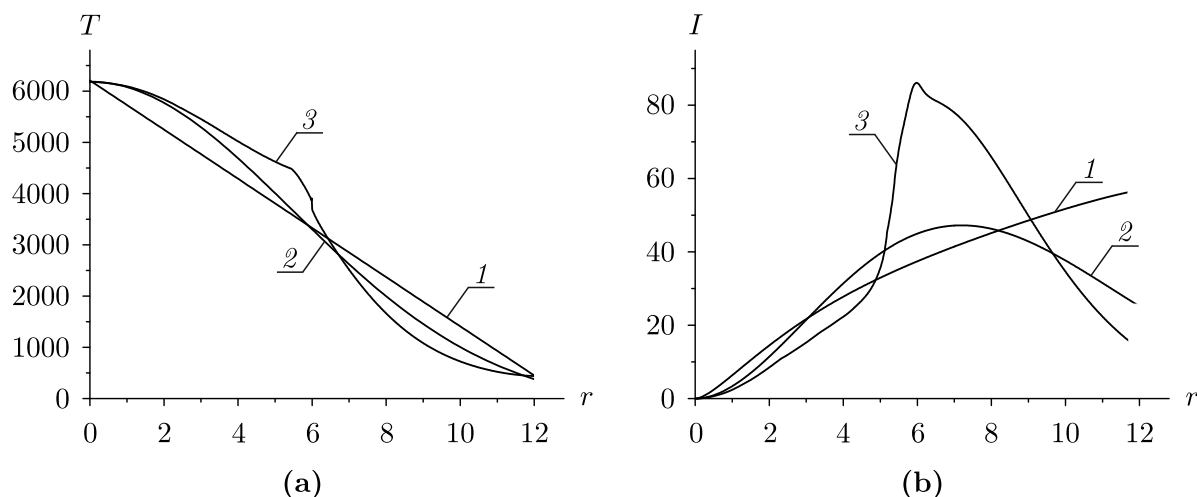


Рис. 2. Графики радиального распределения на поверхности пластинки температуры (а) и соответствующего тока (б). Линейное 1, нормальное 2 и расчётное 3 распределение

В результате расчётов получена картина замкнутых изолиний термотоков (рис. 3). Для линейного распределения температуры (рис. 3(a)) максимум лежит вне образца, поэтому изолинии замыкаются вне рассматриваемой области. В случае нормального распределения (рис. 3(b)) картина изолиний близка к ожидаемой, но симметрична относительно максимума тока. Для расчётного распределения температуры (рис. 3(c)) получена интересная картина изолиний, более соответствующая физике процесса. Левый и правый столбцы на рис. 3 показывают результаты расчётов для регуляризации уравнения (3). Левый столбец рис. 3 показывает, что расчёты уравнения без учёта особенностей приводят к недопустимому получению двух максимумов тока над и под поверхностью образца, чьи значения зависят от параметров сетки. Правый столбец демонстрирует существование только одного максимума. Для случая переменных электрического сопротивления и термоэдс подбор функции сглаживания потребует дополнительной работы.

Можно предположить, что термоэдс металла при высоких температурах выше рассматриваемых нами значений. Расчёты показывают, что с ростом термоэдс металла амплитуда тока будет прямо пропорционально убывать. На рис. 4(a) представлены распределения радиальной компоненты тока для значений термоэдс в металле S^{met} . Амплитуда тока будет убывать и в случае роста проводимости металла (рис. 4(b)), что показывают расчёты с изменяющимся значением электрического сопротивления ρ_e^{met} . В отличие от термоэдс, даже небольшое изменение разности электрического сопротивления в газе и металле приводит к большому изменению амплитуды тока. Поэтому наиболее важным является уточнение значений проводимости материала, которую можно определить как зависимость от температуры [4]. В дальнейшем проводимость паров можно будет выразить через температуру и плотность теплопроводного газа, течение которого зависит от возникающего в нём электрического поля. Таким образом,

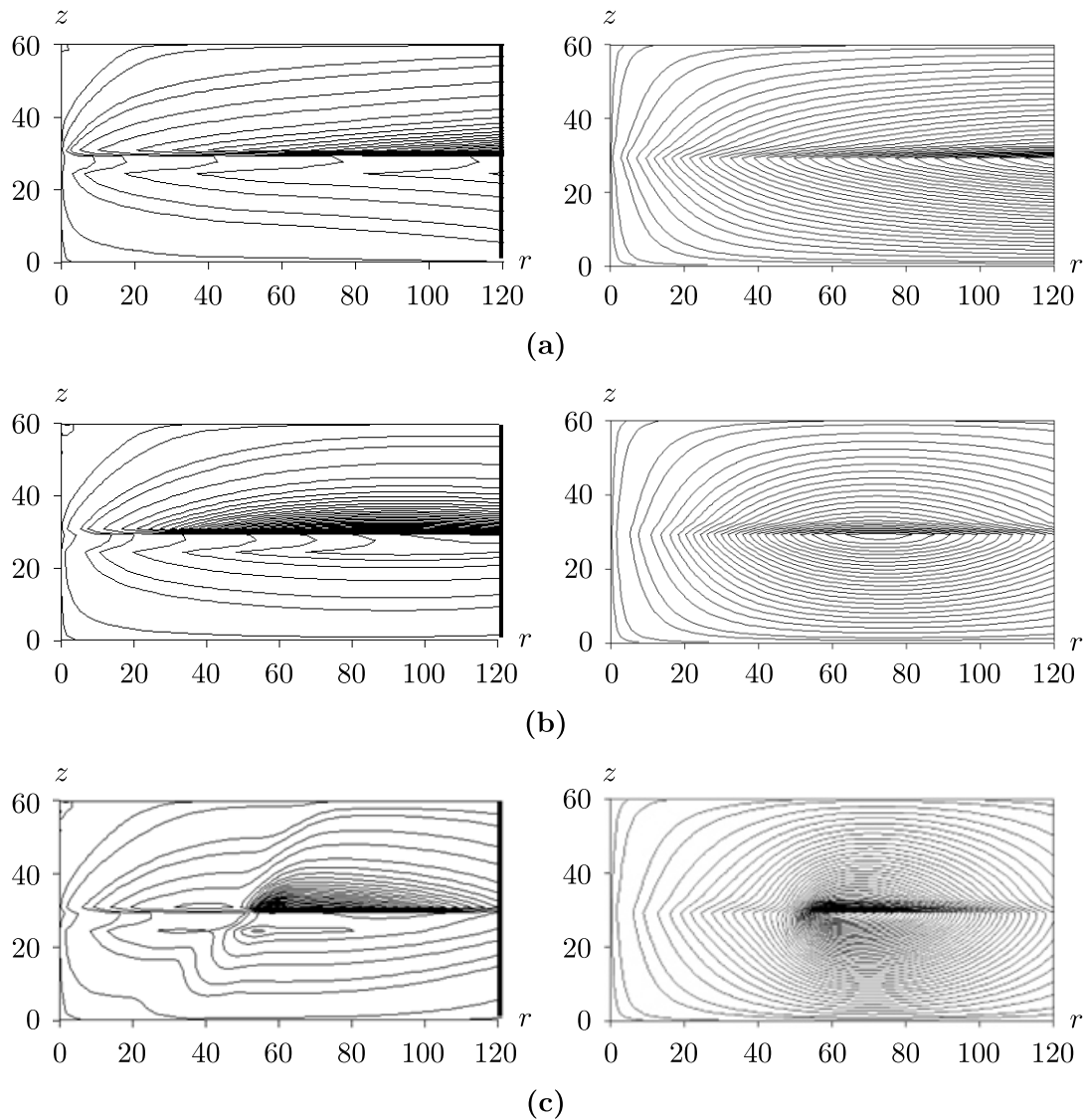


Рис. 3. Распределение радиальной компоненты тока на поперечном срезе пластинки и области над ней для линейного (а), нормального (b) и расчётного (с) распределения температуры на поверхности. Результаты расчётов для уравнения (левый столбец) и регуляризованного уравнения (правый столбец)

расчёты показали существенное влияние особенностей температуры, важность точности определения электрического сопротивления и термоэдс в газе и металле.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлена новая постановка задачи и новая математическая модель распределения тока в образце вольфрама и испаряемом веществе при нагреве поверхности электронным пучком. Проведён анализ модели в упрощённой постановке при постоянных значениях электрического сопротивления и термоэдс в газе и металле. Показано влияние амплитуды и изолиний термотоков от распределения температуры на поверхности образца, значений электрического сопротивления и термоэдс. Использовано модельное распределение температуры испаряемого вольфрама, повторяющее температуру поверхности, что в рассматриваемом тонком слое паров соответствует физике процесса. В образце модельное распределение температуры линейно приближает расчётные значения нагрева вглубь металла. Результаты проведённого мо-

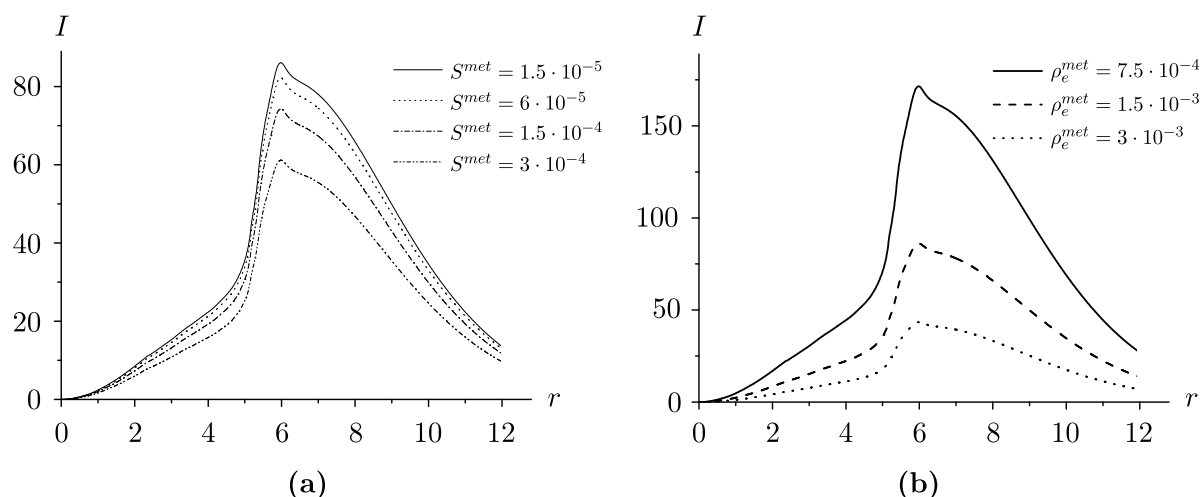


Рис. 4. Распределение радиальной компоненты тока на поперечном срезе пластинки и области над ней для расчётного распределения температуры на поверхности при различных значениях термоэдс (а) и электрического сопротивления металла (б)

делирования показывают, что выбор приближения параметров материала оказывают большое влияние на решение. В зависимости от профиля температуры на поверхности получены различные решения на границе сред. Показано, что с ростом термоэдс металла амплитуда тока будет прямо пропорционально убывать, с ростом электрического сопротивления металла ток тоже будет убывать. Дальнейшее развитие модели предполагает уточнение расчёта удельной электропроводности газа, термоэдс металла, включение численного расчёта температуры и плотности газа.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 23-21-00134; <https://rscf.ru/project/23-21-00134/>). Других источников финансирования проведения или руководства данным конкретным исследованием не было.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Vyacheslavov L., Arakcheev A., Burdakov A., Kandaurov I., Kasatov A., Kurkuchekov V., Mekler K., Popov V., Shoshin A., Skovorodin D., Trunев Y., Vasilyev A. Novel electron beam based test facility for observation of dynamics of tungsten erosion under intense ELM-like heat loads // AIP Conf. Proc. 2016. V. 1771. Article 060004.
2. Arakcheev A. S., Apushkinskaya D. E., Kandaurov I. V., Kasatov A. A., Kurkuchekov V. V., Lazareva G. G., Maksimova A. G., Popov V. A., Snytnikov A. V., Trunев Yu. A., Vasilyev A. A., Vyacheslavov L. N. Two-dimensional numerical simulation of tungsten melting under pulsed electron beam // Fusion Eng. Des. 2018. V. 132. P. 13–17.
3. Lazareva G. G., Popov V. A., Arakcheev A. S., Burdakov A. V., Shwab I. V., Vaskevich V. L., Maksimova A. G., Ivashin N. E., Oksogoeva I. P. Mathematical simulation of the distribution of the electron beam current during pulsed heating of a metal target // J. Appl. Ind. Math. 2021. V. 24, N 2. P. 97–108.
4. Popov V. A., Arakcheev A. S., Kandaurov I. V., Kasatov A. A., Kurkuchekov V. V., Trunев Yu. A., Vasilyev A. A., Vyacheslavov L. N. Theoretical simulation of the closed currents near non-uniformly strongly heated surface of tungsten due to thermo-emf // Phys. Plasmas. 2022. V. 29, N 3. Article 033503.

5. Годунов С. К., Киселев С. П., Куликов И. М., Мали В. И. Моделирование ударно-волновых процессов в упругопластических материалах на различных (атомный, мезо и термодинамический) структурных уровнях. Ижевск: ИКИ, 2014.
6. Li X., Guan Y. Theoretical fundamentals of short pulse laser–metal interaction: A review // *Nanotechnol. Precis. Eng.* 2020. V. 3, N 3. P. 105–125; DOI: 10.1016/j.npe.2020.08.001
7. Lazareva G. G., Arakcheev A. S., Vasilyev A. A., Maksimova A. G. Numerical simulation of tungsten melting under fusion reactor-relevant high-power pulsed heating // *Smart Innov. Syst. Technol.* 2019. V. 133. P. 41–51.
8. Джексон Дж. Классическая электродинамика. М.: Мир, 1965.
9. Бухгольц Г. Расчёт электрических и магнитных полей. М.: Иностранная литература, 1961.
10. Смайт В. Электростатика и электродинамика. М.: Иностранная литература, 1954.
11. Walden J. On the approximation of singular source terms in differential equations // *Numer. Methods Partial Differ. Equ.* 1999. V. 15. N 4. P. 503–520.
12. Загонов В. П. Математическое моделирование электромагнитного воздействия импульсных полей на сложные технические системы // *Функционирование и развитие сложных народнохозяйственных, технических, энергетических, транспортных систем, систем связи и коммуникаций.* 1998. С. 392–394.
13. Жуковский М. Е. Самосогласованная квазитрёхмерная модель радиационного возбуждения электромагнитных полей // *Матем. моделирование.* 1996. Т. 8, № 4. С. 3–20.
14. Sadovskii V. M., Sadovskaya O. V. Mathematical modeling of inhomogeneous electric field impact on a liquid crystal layer // *ZAMM Z. Angew. Math. Mech.* 2022. V. 103, N 1. Article e202200248; DOI: 10.1002/zamm.202200248
15. Садовская О. В., Садовский В. М. Анализ неустойчивого состояния жидкого кристалла на основе модели Озеена—Франка // *Вестн. БашГУ.* Т. 27, № 3. С. 525–529.
16. Droniou J. Finite volume schemes for diffusion equations: introduction to and review of modern methods // *Math. Models Methods Appl. Sci.* 2014. V. 24, N 8. P. 1575–1619; DOI: 10.1142/S0218202514400041
17. Vassilevski Yu., Terekhov K., Nikitin K., Kapyrin I. *Parallel Finite Volume Computation on General Meshes*, 1st ed. Cham: Springer, 2020.
18. Kulikov I., Chernykh I., Tutukov A. A New Hydrodynamic Code with Explicit Vectorization Instructions Optimizations that Is Dedicated to the Numerical Simulation of Astrophysical Gas Flow. I. Numerical Method, Tests, and Model Problems // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* 2019. V. 243, N 1. Article 4; DOI: 10.3847/1538-4365/ab2237
19. Eisenstat S. C., Elman H. C., Schultz M. H. Variational iterative methods for nonsymmetric systems of linear equations // *SIAM J. Numer. Anal.* 1983. V. 20, N 2. P. 345–357.
20. Самарский А. А., Николаев Е. С. *Методы решения сеточных уравнений.* М.: Наука, 1978.
21. Стронгин Р. Г., Гергель В. П., Гришагин В. А., Баркалов К. А. *Параллельные вычисления в задачах глобальной оптимизации.* М.: МГУ, 2013.
22. Lazareva G. G., Arakcheev A. S., Vasilyev A. A., Maksimova A. G. Numerical simulation of tungsten melting under fusion reactor-relevant high-power pulsed heating // *Smart Innov. Syst. Technol.* 2019. V. 133. P. 41–51.

UDC 519.63

MATHEMATICAL MODEL OF CURRENT DISTRIBUTION IN A TUNGSTEN PLATE DURING PULSED HEATING

© 2024 G. G. Lazareva^a, V. A. Popov^b, V. A. Okishev^c*RUDN University, Moscow, 117198 Russia*E-mails: ^alazareva-gg@rudn.ru, ^bv.a.popov94@gmail.com, ^cokishev-va@rudn.ru

Received 26.04.2023, revised 05.05.2023, accepted 07.06.2023

Abstract. In this paper, for the first time, we present a new model of current distribution in a tungsten sample and of substance evaporation when the surface is heated by an electron beam. The model is based on solving electrodynamics equations in a cylindrical coordinate system using a model temperature distribution in the sample and a thin layer of evaporated tungsten. The model is analyzed in a simplified formulation at constant values of electrical resistance and thermoelectric power in gas and metal. The dependence of the amplitude and isolines of thermal currents on the distribution of temperature at the sample surface is shown. The model parameters are taken from experiments at the Beam of Electrons for materials Test Applications (BETA) facility, created at the Budker Institute of Nuclear Physics of the Siberian Branch of the Russian Academy of Sciences.

Keywords: mathematical modeling, thermal current, tungsten, pulsed heating, upper relaxation method, BETA stand, divertor material.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.104

REFERENCES

1. L. Vyacheslavov, A. Arakcheev, A. Burdakov, I. Kandaurov, A. Kasatov, V. Kurkuchekov, K. Mekler, V. Popov, A. Shoshin, D. Skovorodin, Y. Trunev, and A. Vasilyev, “Novel electron beam based test facility for observation of dynamics of tungsten erosion under intense ELM-like heat loads,” *AIP Conf. Proc.* **1771**, 060004 (2016).
2. A. S. Arakcheev, D. E. Apushkinskaya, I. V. Kandaurov, A. A. Kasatov, V. V. Kurkuchekov, G. G. Lazareva, A. G. Maksimova, V. A. Popov, A. V. Snytnikov, Yu. A. Trunev, A. A. Vasilyev, and L. N. Vyacheslavov, “Two-dimensional numerical simulation of tungsten melting under pulsed electron beam,” *Fusion Eng. Des.* **132**, 13–17 (2018).
3. G. G. Lazareva, V. A. Popov, A. S. Arakcheev, A. V. Burdakov, I. V. Shwab, V. L. Vaskevich, A. G. Maksimova, N. E. Ivashin, and I. P. Oksogoeva, “Mathematical simulation of the distribution of the electron beam current during pulsed heating of a metal target,” *J. Appl. Ind. Math.* **24** (2), 97–108 (2021).
4. V. A. Popov, A. S. Arakcheev, I. V. Kandaurov, A. A. Kasatov, V. V. Kurkuchekov, Yu. A. Trunev, A. A. Vasilyev, and L. N. Vyacheslavov, “Theoretical simulation of the closed currents near non-uniformly strongly heated surface of tungsten due to thermo-emf,” *Phys. Plasmas* **29** (3), 033503 (2022).
5. S. K. Godunov, S. P. Kiselev, I. M. Kulikov, and V. I. Mali, *Modeling of Shock Wave Processes in Elastoplastic Materials at Various (Atomic, Meso, and Thermodynamic) Structural Levels* (IKI, Izhevsk, 2014) [in Russian].
6. X. Li and Y. Guan, “Theoretical fundamentals of short pulse laser–metal interaction: A review,” *Nanotechnol. Precis. Eng.* **3** (3), 105–125 (2020). <https://doi.org/10.1016/j.npe.2020.08.001>

7. G. G. Lazareva, A. S. Arakcheev, A. A. Vasilyev, and A. G. Maksimova, “Numerical simulation of tungsten melting under fusion reactor-relevant high-power pulsed heating,” *Smart Innovation Syst. Technol.* **133**, 41–51 (2019).
8. J. D. Jackson, *Classical Electrodynamics* (John Wiley & Sons, New York—London, 1962; Mir, Moscow, 1965).
9. H. Buchholz, *Elektrische und magnetische Potentialfelder* (Springer-Verlag, Berlin—Göttingen—Heidelberg, 1957; Inostr. Lit., Moscow, 1961).
10. W. R. Smythe, *Static and Dynamic Electricity* (McGraw-Hill, New York—Toronto—London, 1950; Inostr. Lit., Moscow, 1954).
11. J. Walden, “On the approximation of singular source terms in differential equations,” *Numer. Methods Partial Differ. Equ.* **15** (4), 503–520 (1999).
12. V. P. Zagonov, “Mathematical modeling of the electromagnetic impact of pulsed fields on complex technical systems,” in *Functioning and Development of Complex National Economic, Technical, Energy, Transport Systems, Communication Systems* (1998), 392–394 [in Russian].
13. M. E. Zhukovsky, “Self-consistent quasi-three-dimensional model of radiative excitation of electromagnetic fields,” *Mat. Model.* **8** (4), 3–20 (1996) [in Russian].
14. V. M. Sadovskii and O. V. Sadovskaya, “Mathematical modeling of inhomogeneous electric field impact on a liquid crystal layer,” *ZAMM Z. Angew. Math. Mech.* **103** (1), e202200248 (2022). <https://doi.org/10.1002/zamm.202200248>
15. O. V. Sadovskaya, and V. M. Sadovskii, “Analysis of the unstable state of a liquid crystal based on the Oseen—Frank model,” *Vestn. BashGU* **27** (3), 525–529 (2022) [in Russian].
16. J. Droniou, “Finite volume schemes for diffusion equations: Introduction to and review of modern methods,” *Math. Models Methods Appl. Sci.* **24** (8), 1575–1619 (2014). <https://doi.org/10.1142/S0218202514400041>
17. Yu. Vassilevski, K. Terekhov, K. Nikitin, and I. Kapyrin, *Parallel Finite Volume Computation on General Meshes* (Springer, Cham, 2020).
18. I. Kulikov, I. Chernykh, and A. Tutukov, “A new hydrodynamic code with explicit vectorization instructions optimizations that is dedicated to the numerical simulation of astrophysical gas flow. I. Numerical method, tests, and model problems,” *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **243** (1), 4 (2019). <https://doi.org/10.3847/1538-4365/ab2237>
19. S. C. Eisenstat, H. C. Elman, and M. H. Schultz, “Variational iterative methods for nonsymmetric systems of linear equations,” *SIAM J. Numer. Anal.* **20** (2), 345–357 (1983).
20. A. A. Samarskii and E. S. Nikolaev, *Methods for Solving Grid Equations* (Nauka, Moscow, 1978) [in Russian].
21. R. G. Strongin, V. P. Gergel’, V. A. Grishagin, and K. A. Barkalov, *Parallel Calculations in Global Optimization Problems* (Mosk. Gos. Univ., Moscow, 2013) [in Russian].
22. G. G. Lazareva, A. S. Arakcheev, A. A. Vasilyev, and A. G. Maksimova, “Numerical simulation of tungsten melting under fusion reactor-relevant high-power pulsed heating,” *Smart Innovation Syst. Technol.* **133**, 41–51 (2019).

УДК 519.63

ДРОБНО-ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЙ ПОДХОД ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННО-ИНДУЦИРОВАННОЙ ЗАРЯДКИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ

© 2024 Л. И. Мороз^a, А. Г. Масловская^b*Амурский государственный университет,
Игнатьевское шоссе, 21, г. Благовещенск 675027, Россия*E-mails: ^alubovep@mail.ru, ^bmaslovskayaag@mail.ruПоступила в редакцию 04.09.2023 г.; после доработки 01.02.2024 г.;
принята к публикации 07.02.2024 г.

В работе предложена дробно-дифференциальная модификация математической модели процесса нестационарной зарядки полярных диэлектрических материалов в условиях облучения электронными пучками средних энергий. В основе математической формализации лежит сферически-симметричное диффузионно-дрейфовое уравнение с производной дробного порядка по времени. С использованием аппроксимации производной Капуто построена неявная конечно-разностная схема. В ППП Matlab разработана прикладная программа, реализующая сконструированный вычислительный алгоритм. Верификация приближенного решения задачи продемонстрирована на тест-примере. Представлены результаты вычислительных экспериментов по оценке характеристик полевых эффектов инжектированных зарядов в сегнетоэлектриках при вариации порядка дробного дифференцирования в субдиффузионных режимах.

Ключевые слова: электронно-индуцированная зарядка, сегнетоэлектрик, дробно-дифференциальное уравнение в частных производных, производная Капуто, неявная конечно-разностная схема, вычислительный эксперимент.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.105

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время широкий ряд эволюционных уравнений математической физики составляет фундаментальную основу математической формализации процессов, протекающих в системах со сложной динамикой. Детерминированные модели в комбинации с технологиями вычислительного эксперимента и средствами компьютерной имитации позволяют прогнозировать пространственно-временные характеристики анализируемых явлений. Особый класс дифференциальных моделей систем, в которых частицы, энергия или другие физические величины передаются внутри системы за счёт двух процессов — диффузии и конвекции, использует в качестве теоретического базиса уравнения типа “реакция — диффузия — конвекция”. В зависимости от предметной области слагаемое, определяющее перенос, соответствует конвекции, адвекции или дрейфу. Уравнения такого вида отличаются своей полифункциональностью, поскольку используются для описания явлений и процессов различной природы и известны многочисленными приложениями в таких областях, как химия, медицина, экология, биология, теория тепло- и массопереноса, физика конденсированного состояния, гидродинамика и др. [1–3].

В физике полупроводников для моделирования транспорта заряженных частиц вводят рассмотрение диффузионно-дрейфовое уравнение, при этом “дрейф” связывают с дрейфовым течением и скоростью дрейфа носителей заряда (электронов проводимости и дырок) [4, 5]. К

рассматриваемому классу задач также можно отнести диффузионно-дрейфовые модели процесса зарядки диэлектриков в неравновесных внешних условиях. Высокий интерес к изучению механизмов зарядки диэлектриков при различных видах ионизирующих воздействий связан с исследованиями в области надёжности функционирования интегральных микросхем в экстремальных условиях, а также с активным использованием этих материалов в оптоэлектронике (например, при создании преобразователей частоты лазерного излучения), космическом материаловедении, плазменных технологических установках и др.

Одной из важнейших частных задач является развитие диффузионно-дрейфового подхода для моделирования процесса зарядки полярных диэлектриков, индуцированного электронным облучением. Практический интерес данная область вызывает в связи с необходимостью прогнозирования состояний функциональных материалов при диагностике и модификации их свойств методами растровой электронной микроскопии, в том числе, в направлениях, связанных с нанодоменной инженерией [6–9]. Разработке фундаментальных основ, развитию математических моделей, созданию математического и программного обеспечения для исследования процессов зарядки диэлектриков при облучении электронными пучками средних энергий посвящён широкий ряд современных работ. В поле зрения исследователей были различные аспекты: физическое обоснование применимости диффузионно-дрейфового подхода [10–12], развитие вычислительных алгоритмов [13–15], использование аналитических подходов к построению решений данного класса задач [16], применение систем конечно-элементного анализа (например, COMSOL Multiphysics, [9, 17]), разработка модификаций модели, направленных на учёт явления запаздывания [18] или зарядку в стационарном режиме электронного зонда [19, 20].

Однако в ряде случаев результаты моделирования характеристик диффузионных процессов, полученные при использовании классических уравнений, приводят к недостаточной степени согласования с данными физических экспериментов. Как правило, подобные ситуации возникают при исследовании неравновесных систем, которые характеризуются сложным строением, присутствием пространственных неоднородностей, неупорядоченностью, нерегулярностью, фрактальностью, мультифрактальностью или самоафинностью структур. Наблюдаемые в таких физических системах явления и процессы могут сопровождаться значительными градиентными изменениями управляющих характеристик или очень длительным временем ожидания эффектов последствия. Распределения длины пути и времени ожидания часто характеризуются “тяжёлыми хвостами” степенного типа. Отличие распределения длины пути от экспоненциального объясняется следствием фрактальности среды, а свойство распределения времени ожидания — присутствием эффектов памяти [21, 22]. Один из базовых подходов построения математических моделей неклассической (или аномальной) диффузии основывается на применении аппарата дробно-дифференциального исчисления [23, 24]. Уравнение аномальной диффузии при вариации порядков дробного дифференцирования позволяет описать широкий класс таких явлений, как классические — перенос, диффузия, волновой процесс, так и “аномальные” — субдиффузия, супердиффузия.

Многие полярные диэлектрические материалы характеризуются свойствами фрактальности топографического и потенциального контраста, а также обнаруживают эффекты памяти и формируют сложные динамические отклики на внешние воздействия. На сегодняшний день известно несколько направлений применения дробно-дифференциального исчисления для моделирования формирования динамических откликов полярных диэлектриков на внешние воздействия различной природы. Так, на основе аналитического вычисления производной дробного порядка в уравнении Колмогорова—Аврами, фрактальных аналогов релаксационных уравнений и дробно-дифференциальной модификации уравнения колебаний произведён расчёт поляризационного тока [25] и диэлектрического отклика полидоменного сегнетоэлектрика [26]. В цикле работ [27] предложена квазистатическая модель диэлектрического гистерезиса. На основе конечно-разностного представления дробной производной получены зависимости по-

ляризации от приложенного электрического поля. Анализ влияния дробных параметров на динамическую характеристику солитонных волн в нелинейном уравнении тонкоплёночных сегнетоэлектрических материалов с дробным временем описан в [28].

В серии авторских работ представлено развитие дробно-дифференциального подхода для моделирования характеристик динамических откликов сегнетоэлектриков: формирование тока переключения поляризации в режиме инжекции электронов на основе численного решения дробно-дифференциального уравнения Колмогорова—Аврами для моделирования тока переключения поляризации в режиме инжекции [29]; переключение поляризации во внешнем поле на основе решения дробно-дифференциального уравнения Ландау—Гинзбурга—Девоншира—Халатникова [30]; генерация пирозлектрического отклика сегнетоэлектрика в условиях интенсивного нагрева и [31]. Основным преимуществом введённых дробно-дифференциальных модификаций является обобщение математических моделей формирования отклика полярных материалов, позволяющих проводить исследования поведения этих систем при вариации динамических режимов в зависимости от порядка дробного дифференцирования.

Настоящая работа направлена на представление возможностей дробно-дифференциального подхода для численного моделирования процесса нестационарной зарядки полярных диэлектриков при электронном облучении. Структура статьи соответствует полному циклу вычислительного эксперимента, который включает введение дробно-дифференциальной модификации модели, построение алгоритма на основе метода конечных разностей, программную реализацию, а также проведение модельных расчётов по оценке характеристик электронно-индуцированной зарядки типичного сегнетоэлектрика ниобата лития.

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФОРМАЛИЗАЦИЯ МОДЕЛИ

Введём концептуальные основы математической модели электронно-индуцированной зарядки полярных диэлектриков и перечислим принятые физические допущения. В качестве модельных объектов будем рассматривать типичные сегнетоэлектрики, для которых известна практика применения методов растровой электронной микроскопии для анализа свойств и модификации их полярных структур. Будем полагать, что образец подвержен облучению сфокусированным пучком электронов средних энергий (1–40 кэВ). Из многочисленных эффектов воздействия электронного облучения на диэлектрик будем рассматривать эффект зарядки с учётом собственной электронно-стимулированной проводимости образца. Будем считать, что при использовании нанесённых тонких металлических электродов их влияние пренебрежимо мало, а включение источника в образец происходит мгновенно. Учтём, что кристаллические материалы моделируются сплошными изотропными средами, для которых, по данным литературных источников, могут быть инициализированы общие физические и химические параметры, а также электрические характеристики. В простейшем случае будем считать, что модель является сферически-симметричной: характеристики процесса зависят от времени и одной пространственной координаты — радиуса. Линейный размер объекта выбирается таким образом, чтобы краевые эффекты не играли существенной роли при численном решении задач. Результатом моделирования является пространственно-временные распределения объёмной плотности инжектированных зарядов, потенциала и индуцированного электрического поля.

Математическая модель процесса электронно-индуцированной зарядки полярных диэлектриков описывается системой соотношений, в которую входит реакционно-диффузионно-дрейфовое уравнение для расчёта распределения объёмной плотности зарядов, уравнение Пуассона для определения локально-мгновенного распределения потенциала и уравнение, выражающее связь между напряжённостью и потенциалом [15]:

$$\begin{aligned}\frac{\partial \rho}{\partial t} &= D\Delta\rho - \mu_n(\mathbf{E}, \text{grad } \rho) - \frac{\mu_n}{\varepsilon\varepsilon_0}\rho^2 + G, \\ \Delta\varphi &= -\frac{\rho}{\varepsilon\varepsilon_0}, \quad \mathbf{E} = -\text{grad } \varphi,\end{aligned}\tag{1}$$

где ρ — объёмная плотность заряда, [Кл/м³]; φ — потенциал поля, [В]; D — коэффициент диффузии электронов, [м²/с]; μ_n — дрейфовая подвижность электронов, [м²/(В·с)]; ε — диэлектрическая проницаемость материала; ε_0 — электрическая постоянная, [Ф/м]; G — генерационное слагаемое, отвечающее за действие объёмного источника зарядов в объекте, [Кл/(м³·с)]; $\mathbf{E}$ — напряжённость электрического поля, [В/м].

Формализация модели с использованием системы (1) соответствует общему случаю, когда в некотором диэлектрическом материале создан объёмный заряд свободных частиц определённого знака [32]. Поскольку в контексте настоящей работы приоритетным рассматривается процесс электронно-индуцированной зарядки диэлектриков, далее мы будем проводить расчёт абсолютных величин пространственно-временных характеристик процесса зарядки, подразумевая соответствующий знак носителей заряда. Отметим, что более сложные модификации модели зарядки будут включать генерационные, рекомбинационные, диффузионно-дрейфовые процессы неравновесных носителей двух знаков — электронов и дырок соответственно. Математическая постановка задачи дополняется заданием соответствующих начальных и граничных условий. Для аппроксимации функции источника в уравнении (1) используют различные подходы, одним из которых является использование дискретно-динамического моделирования транспорта электронов в облучённых материалах методом Монте-Карло [33].

В рамках настоящей работы допустим, что объект и внутренний источник зарядов, действующий в нём, обладают сферической симметрией (при локальном воздействии источника и определённой энергии пучка такое приближение можно считать оправданным). На рис. 1 показана геометрическая схема образца и внутреннего источника заряда, создаваемого сфокусированным пучком инжектированных электронов.

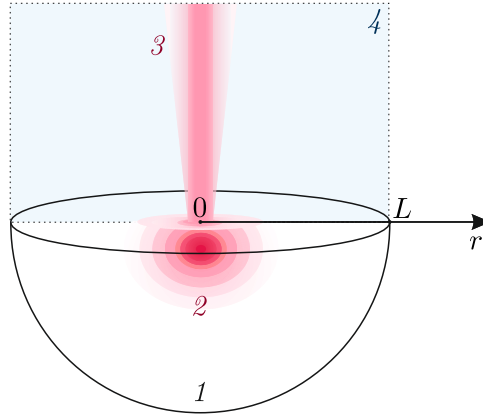


Рис. 1. Геометрическая схема объекта и внутреннего источника заряда, 1 — образец, 2 — область инжекции, 3 — пучок электронов, 4 — вакуум

Принимая во внимание геометрию задачи и формализуя присутствие эффектов памяти в физической системе, введём в рассмотрение дробно-дифференциальный аналог модели процесса зарядки полярного диэлектрика при электронном облучении:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^\alpha \rho}{t^* \partial \theta^\alpha} &= D \frac{\partial^2 \rho}{\partial r^2} + \frac{2D}{r} \frac{\partial \rho}{\partial r} - \mu_n E \frac{\partial \rho}{\partial r} - \frac{\mu_n}{\varepsilon\varepsilon_0} \rho^2 + G, \\ \frac{d^2 \varphi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\varphi}{dr} &= -\frac{\rho}{\varepsilon\varepsilon_0}, \quad E = -\frac{d\varphi}{dr},\end{aligned}\tag{2}$$

где $\rho = \rho(r, \theta)$ — пространственно-временное распределение плотности зарядов в объекте, [Кл/м³]; $\varphi = \varphi(r)$ — пространственное распределение потенциала, [В]; $G = G(r)$ — функция источника, [Кл/(м³·с)], $0 < r < L$; $0 < \theta \leq T/t^*$; $\theta = t/t^*$; t^* — некоторое характерное время процесса, [с]; $\frac{\partial^\alpha \rho}{\partial \theta^\alpha}$ — производная Капуто, $0 < \alpha < 1$.

Специфика модельной формализации быстрых релаксационных процессов электронно-индуцированной зарядки полярных материалов (по сравнению с классической моделью Максвелловской релаксации), наблюдаемых в экспериментальной практике, во многом “обязана” модификации, связанной с учётом электронно-стимулированной проводимости в образце, и присутствием нелинейного слагаемого $-\mu\rho^2/(\varepsilon\varepsilon_0)$ в правой части ведущего уравнения системы (1).

Заметим, что в данной работе рассматривается левосторонняя дробная производная Капуто, определённая как

$$\frac{d^\alpha \rho(\theta)}{d\theta^\alpha} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^\theta \frac{\rho'(\xi)d\xi}{(\theta-\xi)^\alpha}, \quad (3)$$

где $0 < \alpha < 1$, $\Gamma(\cdot)$ — гамма-функция Эйлера.

Здесь введён в рассмотрение частный случай, при котором уравнение аномальной диффузии и диапазон изменения порядка дробной производной по координате будут соответствовать субдиффузионному режиму.

В качестве замечания, отметим, что интерпретация дробных производных как способа учёта эффекта памяти (собственной временной нелокальности) и пространственных корреляций (пространственной нелокальности) привела к их широкому использованию в естественных науках. Нелокальность во времени содержится в ядре интегрального оператора. Многие авторы отмечают, что целочисленная производная по времени от динамического вклада приводит к завышению расчётных значений по сравнению с экспериментальными данными, относящимися к сегнетоэлектрическим материалам [25, 27, 34–36]. Кроме того, экспериментально подтверждено, что рост неравновесных доменов в сегнетоэлектриках является субдиффузионным процессом. Такое поведение указывает на сильно взаимодействующее и коррелирующее неравновесное состояние между временно образующимися стенками доменов [36]. Добавим, что уравнение аномальной диффузии используется при рассмотрении таких сложных явлений, как диффузия в пористых средах, диффузия по границам зёрен и др. [21].

Генерационное слагаемое в первом уравнении системы (2) зададим, используя результат работы авторской программы по моделированию потерь энергии электронами в веществе [15, 18]. В простейшем случае для аппроксимации можно воспользоваться функцией Гаусса $G(r) = G_0 \exp(-(r-r_c)^2/(2\sigma^2))$, при этом необходимо учесть, что максимум электронной плотности приходится не на точку падения зонда.

Для замыкания математической формулировки реакционно-диффузионно-дрейфовое уравнение и обыкновенное дифференциальное уравнение системы (2) необходимо дополнить начальным

$$\rho|_{\theta=0} = \rho^0(r), \quad 0 < r < L \quad (4)$$

и граничными условиями

$$\left. \frac{\partial \rho}{\partial r} \right|_{r=0} = 0, \quad \rho|_{r=L} = 0, \quad \left. \frac{d\varphi}{dr} \right|_{r=0} = 0, \quad \varphi|_{r=L} = 0, \quad 0 < \theta \leq T/t^*. \quad (5)$$

Как известно, построение аналитических решений многих классов дробно-дифференциальных задач вызывает затруднения, поэтому особую роль в практике программной реализации моделей играют методы численного анализа, в частности, метод конечных разностей. Кроме того, для уравнений вида “конвекция-диффузия” очень важным является вопрос соотношения этих процессов и соответствующего доминирования диффузии

или конвекции в условиях конкретного набора модельных параметров. Как правило, рассматривают два класса задач [3]: регулярно возмущённые (доминирует диффузия, малые числа Пекле) и сингулярно возмущённые (доминирует конвекция, большие числа Пекле).

2. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СХЕМА

Введём в рассмотрение пространственно-временную сетку $\Omega_h^\tau = \{r_i = ih, i = \overline{0, M}, \theta^j = j\tau, j = \overline{0, N}\}$, где h — шаг по координате, τ — шаг по времени. Для построения конечно-разностной аппроксимации уравнения, определяющего пространственно-временное распределение плотности зарядов, воспользуемся результатами, описанными в работах авторов [37], которые посвящены конструированию и исследованию эффективных численных схем для решения частных случаев диффузионно-волновых уравнений с нецелой производной по времени. Так, для конечно-разностной аппроксимации дробной производной Капуто (3) используем формулу

$$\left. \frac{\partial^\alpha \rho}{\partial \theta^\alpha} \right|_i^{j+1} = \frac{\tau^{-\alpha}}{\Gamma(2-\alpha)} \sum_{k=0}^j b_k \left(\rho_i^{j+1-k} - \rho_i^{j-k} \right) + O(\tau^{2-\alpha}), \quad (6)$$

где $\rho_i^j = \rho(r_i, \theta^j)$, $b_k = (k+1)^{1-\alpha} - k^{1-\alpha}$, $k = 0, 1, 2, \dots, N$.

Приближенное значение производной второго порядка запишем в следующем виде:

$$\left. \frac{\partial^2 \rho}{\partial r^2} \right|_i^{j+1} = \frac{\rho_{i-1}^{j+1} - 2\rho_i^{j+1} + \rho_{i+1}^{j+1}}{h^2} + O(h^2). \quad (7)$$

Для аппроксимации дрейфового слагаемого используем формулу Роберта—Вейсса [3, 38]:

$$\left. \frac{\partial \rho}{\partial r} \right|_i^{j+1} = \frac{\rho_i^{j+1} - \rho_{i-1}^{j+1} + \rho_{i+1}^j - \rho_i^j}{2h} + O(h^2). \quad (8)$$

Использование формулы (8), в отличие от центральной разностной схемы, позволяет построить монотонную конечно-разностную схему. На основе формул (6)–(8) сконструируем неявную конечно-разностную схему

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{D}{h^2} + \frac{D}{hr_i} - \frac{\mu_n E_i^j}{2h} \right) \rho_{i-1}^{j+1} + \left(\frac{\tau^{-\alpha} b_0}{t^* \Gamma(2-\alpha)} + \frac{2D}{h^2} - \frac{D}{hr_i} + \frac{\mu_n E_i^j}{2h} + \frac{\mu_n}{\varepsilon \varepsilon_0} \rho_i^j \right) \rho_i^{j+1} - \frac{D}{h^2} \rho_{i+1}^{j+1} = \\ & = \frac{\tau^{-\alpha}}{t^* \Gamma(2-\alpha)} \left(-\sum_{k=1}^j b_k \left(\rho_i^{j+1-k} - \rho_i^{j-k} \right) + b_0 \rho_i^j \right) + \left(\frac{D}{hr_i} - \frac{\mu_n E_i^j}{2h} \right) \left(\rho_{i+1}^j - \rho_i^j \right) + G_i, \end{aligned} \quad (9)$$

где $i = 1, \dots, M-1$ и $j = 0, \dots, N-1$.

Отметим, что общий порядок аппроксимации вычислительной схемы (9) будет определяться порядками аппроксимаций производных по времени и координате соответственно $O(\tau^{2-\alpha} + h^2)$. Из начального и граничного условий определим значения $\rho_i^0 = \rho^0$ для $i = 0, \dots, M$ и $\rho_M^{j+1} = 0$ для $j = 0, \dots, N-1$. Для аппроксимации граничного условия II рода, включающего производную первого порядка, используем несимметричную конечно-разностную формулу

$$\frac{-3\rho_0^{j+1} + 4\rho_1^{j+1} - \rho_2^{j+1}}{2h} = 0 \quad (10)$$

для $j = 0, \dots, N-1$. Аналогично можно записать уравнения, аппроксимирующие граничные условия для потенциала поля φ . На каждом временном слое происходит расчёт распределения потенциала на основе решения краевой задачи для обыкновенного дифференциального уравнения методом конечных разностей:

$$\left(1 - \frac{h}{r_i} \right) \varphi_{i-1} - 2\varphi_i + \left(1 + \frac{h}{r_i} \right) \varphi_{i+1} = -\frac{h^2 \rho_i^j}{\varepsilon \varepsilon_0}, \quad (11)$$

где $\varphi_M = 0$, $i = 1, \dots, M - 1$ и $j = 0, \dots, N$.

Все полученные системы линейных уравнений решались методом Гаусса. Напряжённость электрического поля E можно вычислить с использованием аппроксимации производной с помощью формулы центральной разности. Для сохранения второго порядка аппроксимации по координате для нелинейного уравнения системы (2), вычислительный процесс может быть дополнен алгоритмом итерационной обработки на каждом временном шаге. Кроме того, несмотря на то, что итоговая вычислительная схема сконструирована на основе известных и всесторонне изученных методов, вопросы аналитического исследования устойчивости и сходимости составляют отдельную научную подзадачу. В рамках настоящей работы мы ограничились численным исследованием практической сходимости сконструированного алгоритма.

3. ТЕСТ-ПРИМЕР

Описанный алгоритм численного решения дробно-дифференциальной задачи был реализован в виде прикладной программы в ППП Matlab. Результат применения вычислительной схемы (9)–(11) продемонстрируем на примере решения тестовой задачи, записанной в безразмерном виде. Рассмотрим следующее уравнение аномальной диффузии

$$\frac{\partial^\alpha u}{\partial t^\alpha} = 0.05 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - 0.4 \frac{\partial u}{\partial x}, \quad 0 < x < 1, \quad t > 0 \quad (12)$$

с начальным условием

$$u|_{t=0} = \exp\left(-\frac{(x-2)^2}{0.2}\right), \quad 0 < x < 1 \quad (13)$$

и заданными краевыми условиями

$$\left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = \frac{0.8t + 4}{0.2(t+1)} \sqrt{\frac{1}{1+t}} \exp\left(\frac{-(-2-0.4t)^2}{0.2(t+1)}\right), \quad t > 0, \quad (14)$$

$$u|_{x=1} = \sqrt{\frac{1}{1+t}} \exp\left(-\frac{(-1-0.4t)^2}{0.2(t+1)}\right), \quad t > 0. \quad (15)$$

На рис. 2 представлены численные решения задачи (12)–(15) при варьировании значений порядка дробной производной по времени α . Для определённости временной диапозон ограничим промежутком $0 \leq t \leq 5$. Графическая визуализация соответствует последнему моменту времени и параметрам сетки $h = \tau = 0.05$.

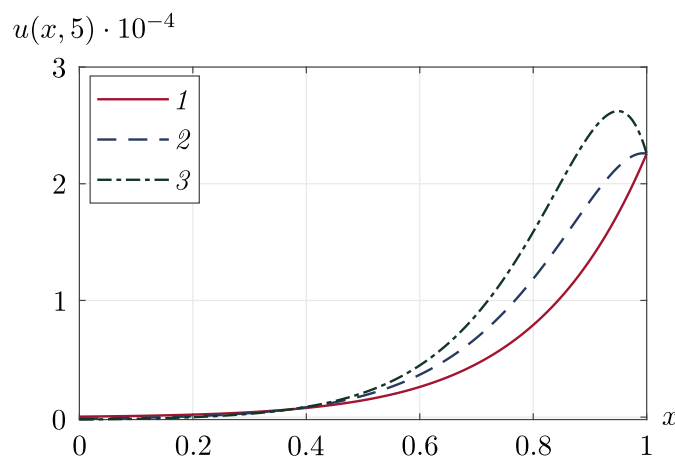


Рис. 2. Графическое представление численного решения задачи (координатный профиль в момент времени $t = 5$) при $\alpha = 0.99$ (1), $\alpha = 0.8$ (2) и $\alpha = 0.6$ (3)

При проверке адекватности работы вычислительного алгоритма используем следующий подход. Проведём сравнение численного решения дробно-дифференциальной задачи (12)–(15) в предельном режиме при $\alpha \approx 1$ с аналитическим решением классического аналога этой же задачи при $\alpha = 1$:

$$u_{ex}(x, t) = \sqrt{\frac{1}{1+t}} \exp\left(-\frac{(x-2-0.4t)^2}{0.2(t+1)}\right).$$

Точность вычислительной схемы для решения дробно-дифференциальной задачи зависит от порядка дробной производной по времени и параметров сетки. Поэтому для верификации решения задачи установим значение α близким к единице, например, $\alpha = 0.9999999$. Для проведения практического анализа погрешностей воспользуемся широко известным в вычислительной практике методом — зафиксируем шаг сетки по времени и вычислим относительную погрешность при варьировании шага сетки по координате, и наоборот. Оценку относительной погрешности результатов проведём с использованием l_2 -нормы отклонения приближенного решения от точного, вычисленной для последнего момента времени:

$$\delta = \frac{\|u_{ex} - u\|}{\|u_{ex}\|},$$

где u — численное решение задачи (12)–(15).

Результат вычисления относительной погрешности при варьировании сеточных параметров представлен в таблице 1. Полученные результаты свидетельствуют о том, что установленная ошибка соответствует теоретическим оценкам и схема (9)–(11) обеспечивает приемлемую точность вычислений.

Таблица 1

Относительная погрешность δ численного решения задачи (12)–(15)

h при $\tau = 0.001$	δ	τ при $h = 0.001$	δ
1/10	$1.7932 \cdot 10^{-2}$	1/10	$7.6324 \cdot 10^{-3}$
1/20	$4.3251 \cdot 10^{-3}$	1/20	$3.8246 \cdot 10^{-3}$
1/40	$1.1021 \cdot 10^{-3}$	1/40	$1.9271 \cdot 10^{-3}$
1/80	$3.3446 \cdot 10^{-4}$	1/80	$9.6663 \cdot 10^{-4}$
1/160	$1.3983 \cdot 10^{-4}$	1/160	$4.8460 \cdot 10^{-4}$
1/320	$9.2822 \cdot 10^{-5}$	1/320	$2.4319 \cdot 10^{-4}$
1/640	$8.1207 \cdot 10^{-5}$	1/640	$1.2238 \cdot 10^{-4}$

Сравнение аналитического u_{ex} и численного u (при $h = \tau = 0.05$ и $\alpha = 0.9999999$) решений задачи (12)–(15) в заключительный момент времени показано на рис. 3.

4. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

В рамках вычислительного эксперимента представим оценку пространственно-временных характеристик процесса зарядки типичного сегнетоэлектрического кристалла ниобата лития LiNbO_3 в условиях облучения электронным пучком средних энергий (1–40 кэВ). Ниобат лития относят к перспективным функциональным материалам микро-, оптоэлектроники и интересным объектом доменной инженерии — направлении, основанном на локальном переключении поляризации с целью формирования доменов сегнетоэлектрика микронных, субмикронных и наноразмерных масштабов [6–9].

Введённую в рассмотрение модель (2), (4), (5) можно использовать для имитации зарядовых процессов в двух практически реализуемых режимах: релаксация “набитого” в образец заряда (при заданной функции начального распределения плотности заряда и в отсутствие функции источника) и динамика накопления заряда в объекте (соответственно, при нулевом

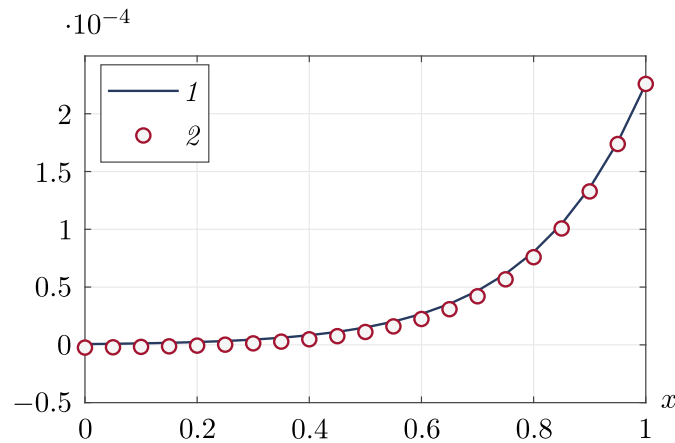


Рис. 3. Визуализация координатных зависимостей для аналитического $u_{ex}(x, 5)$ (1) и численного $u(x, 5)$ (2) решений тестовой задачи в момент времени $t = 5$

начальном распределении и мгновенном “включении” функции источника). Рассмотрим простейший режим релаксации заряда. Ключевые параметры модели, определяющие характеристики ниобата лития [15, 18], константы и варьируемые параметры вычислительного процесса представлены в таблице 2. Шаги по пространственной и временной переменным выбирались в соответствии с требованием обеспечения точности на основе численного анализа сходимости схемы и установлены равными $h = 0.2$ мкм, $\tau = 0.02$ пс.

Таблица 2

Параметры моделирования

Название, [ед. измерения]	Значение
Диэлектрическая проницаемость материала ε	30
Дрейфовая подвижность электронов μ_n , [м ² /(В·с)]	$74 \cdot 10^{-6}$
Коэффициент диффузии D , [м ² /с]	$1.915 \cdot 10^{-6}$
Электрическая постоянная ε_0 , [Ф/м]	$8.85 \cdot 10^{-12}$
Линейный размер объекта L , [м]	$100 \cdot 10^{-6}$
Время наблюдения процесса T , [с]	10^{-11}

Для оценки функции плотности заряда в начальный момент времени воспользуемся результатом предшествующих исследований [15, 18]. На основе компьютерного моделирования транспорта электронов в облучённой мишени методом Монте-Карло проведём аппроксимацию локальной области взаимодействия пучка электронов с образцом и введём начальное распределение плотности зарядов $\rho^0(r) = \tilde{\rho}(1 - \nu) \exp(-(r - \omega_1)^2/(2\omega_2^2))$, где ν — коэффициент вторичной электронной эмиссии электронов, $\tilde{\rho}$, ω_1 , ω_2 — параметры аппроксимации. Инициализируя набор параметров для симуляции методом Монте-Карло — стартовая энергия пучка 25 кэВ при поверхностной плотности зарядов 10 Кл/м², получим, что коэффициент вторичной электронной эмиссии и параметры аппроксимации соответствуют значениям: $\nu = 0.244$, $\tilde{\rho} = 2.09 \cdot 10^6$ Кл/м³, $\omega_1 = 0.76$ мкм, $\omega_2 = 0.75$ мкм. Так как граница, для которой установлены краевые условия I рода (5), значительно удалена от градиентной зоны, при визуализации характеристик имеет смысл ограничивать диапазон изменения пространственной координаты.

В первом модельном эксперименте визуализируем пространственно-временные распределения, характеризующие процесс релаксации электронно-индуцированного заряда в образце ниобата лития в условиях, соответствующих классическому диффузионному режиму (порядок дробной производной по времени α приближен к единице). Результаты расчёта объёмной плотности зарядов и потенциала индуцированного поля показаны на рис. 4. На рис. 5 отображены координатные профили изменения абсолютной величины напряжённости при значении

$\alpha = 0.99$.

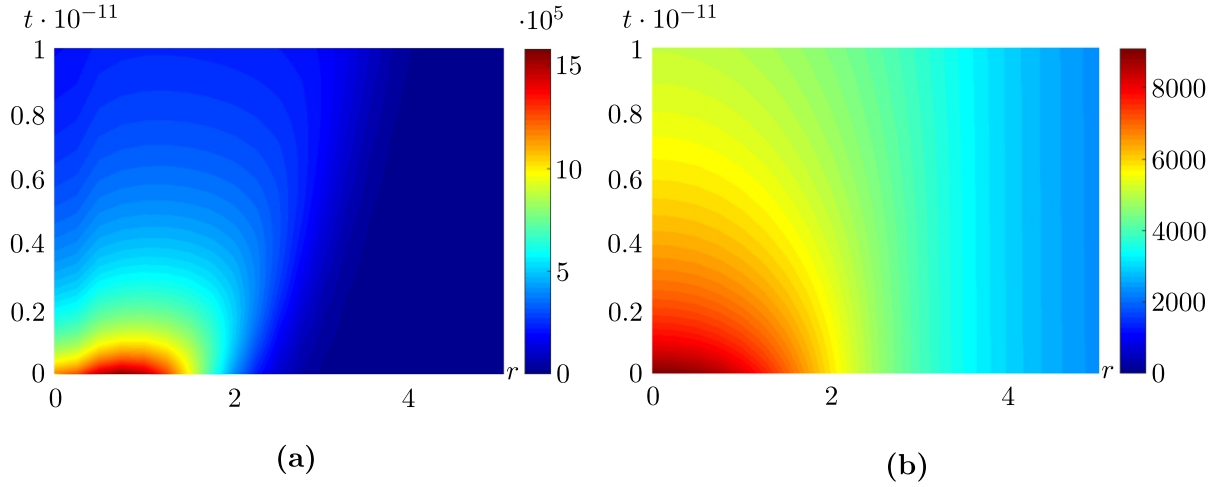


Рис. 4. Пространственно-временные (t [с], r [$\cdot 10^{-6}$ м]) распределения абсолютных величин, характеризующих процесс релаксации электронно-стимулированного заряда в кристалле ниобата лития: (а) плотность заряда $\rho(r, t)$ [Кл/м³] и (б) потенциал $\varphi(r, t)$ [В]

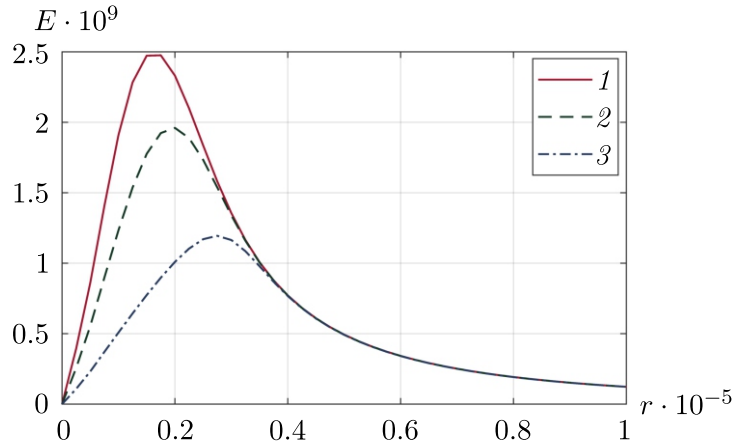


Рис. 5. Координатные профили изменения абсолютной величины индуцированного поля E [В/м] от радиуса r [м] в фиксированные моменты времени: 1 — t_0 , 2 — $t_1 = 0.1$ пс, 3 — $t_2 = 0.5$ пс

Отметим, что несмотря на выраженное влияние диффузионных эффектов на координатное распределение характеристик, начальный диапазон времени релаксации соответствует режиму с преобладающим дрейфом (значительные числа Пекле). В аспекте физических экспериментов по исследованию процессов зарядки сегнетоэлектриков при электронном облучении [6, 7], как правило, основополагающим вопросом является выявление условий, при которых инжектированный заряд способен инициировать поляризационные эффекты и привести к переключению кристалла. В режиме релаксации такой эффект можно рассматривать только в начальной фазе процесса при условии выбора значений энергии пучка и поверхностной плотности энергии, чтобы эти характеристики формировали индуцированное поле в объекте, соизмеримое со значением коэрцитивного поля. В данном случае, как можно видеть из рис.4, на границе зоны инжекции (~ 2 мкм) поле значительно превышает значение коэрцитивного для ниобата лития $E_c \sim 10^6$ В/м.

Кроме того, существенный интерес представляет прогнозирование времени релаксации заряда в конкретных условиях зарядки. Дробно-дифференциальная модификация математи-

ческой модели зарядки в нашем случае учитывает эффект “динамической памяти” системы. Поэтому представляет интерес модельный расчёт пространственно-временного распределения объёмной плотности зарядов при вариации динамической дробной размерности процесса, за которую отвечает порядок дробного дифференцирования по времени. Серия расчётов, проведённых для различных значений α , свидетельствует о том, что в субдиффузионных режимах уменьшение порядка дробной производной по времени соответствует снижению времени релаксации индуцированного в полярном диэлектрике заряда. Так, приближенная оценка времени релаксации для классического режима составляет 10 пс, в то время как для $\alpha = 0.95$ это значение равно 2.5 пс, а для $\alpha = 0.9$ — 1 пс. Более детально эффект “памяти”, выраженный в данном случае снижением максимального уровня объёмной плотности зарядов в процессе релаксации, при варьировании динамических режимов иллюстрируется на рис.6.

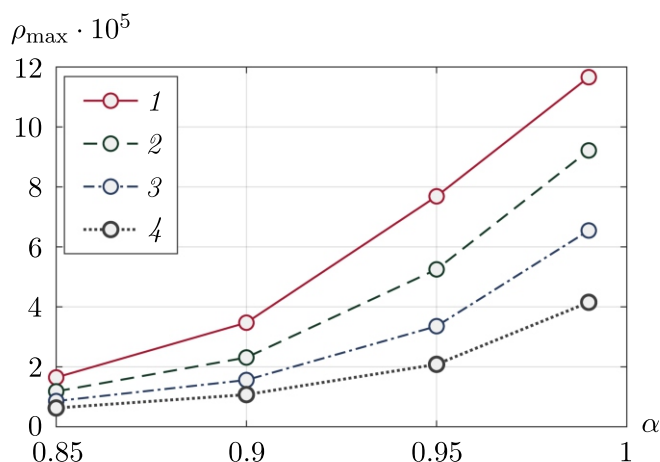


Рис. 6. Максимальные значения абсолютной величины объёмной плотности зарядов $\rho_{\max} [\text{Кл/м}^3]$ для различных значений порядка дробного дифференцирования в фиксированные моменты времени: 0.625 пс (1), 1.25 пс (2), 2.5 пс (3) и 5 пс (4)

Использование аппарата дробного дифференцирования по времени позволяет модифицировать дифференциальную модель процесса зарядки с учётом эффектов памяти, сопровождающих динамические процессы, протекающие в сегнетоэлектриках. В этом случае динамическая память физической системы определяет скорость релаксационных процессов, а порядок дробного дифференцирования по времени выступает дополнительным управляющим параметром математической модели, что даёт возможность выбирать адекватные формализованные представления и прогнозировать электрические характеристики полярного диэлектрика.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в работе предложено дробно-дифференциальное обобщение модели, описывающей процесс нестационарной зарядки сегнетоэлектрических материалов в различных динамических режимах при облучении электронными пучками средних энергий. В рамках настоящего исследования формализована и численно реализована сферически-симметричная модель, соответствующая субдиффузионному процессу зарядки полярного диэлектрика с учётом собственной электронно-стимулированной проводимости образца и инжекционных эффектов.

Для построения алгоритма реализации модели сконструирована неявная конечно-разностная схема на основе аппроксимации дробной производной Капуто, эффективность которой продемонстрирована на решении тестовой задачи. Вычислительный алгоритм был реализован в виде прикладной программы в пакете Matlab. Проведена серия вычислительных экспериментов по визуализации пространственно-временных характеристик процессов релаксации зарядов в типичном сегнетоэлектрике ниобата лития, соответствующих условиям экспе-

риментального наблюдения и модификации материалов с использованием методик растровой электронной микроскопии.

Модельные расчёты свидетельствуют об изменении тенденций поведения основных электрических характеристик при вариации субдиффузионных режимов, соответствующих различным значениям порядка дробной производной по времени. В частности, можно диагностировать, что учёт эффектов памяти отвечает протеканию процессов с сокращённым временем релаксации по сравнению с классическим диффузионным режимом. При этом динамическая дробная размерность процесса, за которую отвечает порядок дробного дифференцирования по времени, является основным управляющим параметром. Перспективу настоящего исследования составляет развитие модели с учётом многомерного представления, вариаций режимов зарядки и возможного прогнозирования условий электронно-стимулированного переключения поляризации сегнетоэлектрических структур.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ (проект 122082400001-8). Других источников финансирования проведения или руководства данным конкретным исследованием не было.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Otten D. Mathematical models of reaction diffusion systems, their numerical solutions and the freezing method with Comsol Multiphysics. Bielefeld: Bielefeld University, 2000.
2. Patankar S. V. Numerical heat transfer and fluid flow. Washington: Hemisphere Publ. Corp., 1980.
3. Самарский А. А., Вабищевич П. Н. Численные методы решения задач конвекции-диффузии. М.: Книжный дом «ЛИБРОКОМ», 2015.
4. Kan T., Suzuki M. Uniform estimates and uniqueness of stationary solutions to the drift-diffusion model for semiconductors // Appl. Anal. 2019. V. 5, N 10. P. 1799–1810; DOI: 10.1080/00036811.2018.1460820
5. Rekhviashvili S. S., Alikhanov A. A. Simulation of drift-diffusion transport of charge carriers in semiconductor layers with a fractal structure in an alternating electric field // Semiconductors. 2017. V. 51. P. 755–759; DOI: 10.1134/S1063782617060264
6. He J., Tang S. H., Qin Y. Q., Dong P., Zhang H. Z., Kang C. H., Sun W. X., Shen Z. X. Two-dimensional structures of ferroelectric domain inversion in LiNbO₃ by direct electron beam lithography // J. Appl. Phys. 2003. V. 93. P. 9943–9947; DOI: 10.1063/1.1575918
7. Коханчик Л. С., Иржак Д. В. Формирование регулярных доменных структур и особенности переключения спонтанной поляризации в кристаллах танталата лития при дискретном облучении электронами // Физика твёрдого тела. 2010. Т. 52, № 2. С. 285–289.
8. Рау Э. И., Евстафьева Е. Н., Адрианов М. В. Механизмы зарядки диэлектриков при их облучении электронными пучками средних энергий // Физика твёрдого тела. 2008. Т. 50, № 4. С. 599–607.
9. Chezganov D. S., Kuznetsov D. K., Shur V. Ya. Simulation of spatial distribution of electric field after electron beam irradiation of MgO-doped LiNbO₃ covered by resist layer // Ferroelectrics. 2016. V. 496. P. 70–78; DOI: 10.1080/00150193.2016.1157436
10. Chan D. S. H., Sim K. S., Phang J. C. H. A simulation model for electron irradiation induced specimen charging in a scanning electron microscope // Scan. Microsc. 1993. V. 7, N 3. P. 847–859.
11. Melchiger A., Hofmann S. Dynamic double layer model. Description of time dependent charging phenomena in insulators under electron beam irradiation // J. Appl. Phys. 1995. V. 78, N 10. P. 6224–6232; DOI: 10.1063/1.360569

12. *Cazaux J.* About the mechanisms of charging in EPMA, SEM, and ESEM with their time evolution // *Microsc. Microanal.* 2004. V. 10, N 6. P. 670–680; DOI: 10.1017/s1431927604040619
13. *Kotera M., Yamaguchi K., Suga H.* Dynamic simulation of electron-beam-induced charging up of insulators // *Jpn. J. Appl. Phys.* 1999. V. 38, N 12S. P. 7176–7179; DOI: 10.1143/JJAP.38.7176
14. *Ohya K., Inai K., Kuwada H., Hauashi T., Saito M.* Dynamic simulation of secondary electron emission and charging up of an insulting material // *Surf. Coat. Technol.* 2008. V. 202. P. 5310–5313; DOI: 10.1016/j.surfcoat.2008.06.008
15. *Maslovskaya A., Pavelchuk A.* Simulation of dynamic charging processes in ferroelectrics irradiated with SEM // *Ferroelectrics.* 2015. V. 476, N 2. P. 157–167; DOI: 10.1080/00150193.2015.998111
16. *Kalmanovich V. V., Seregina E. V., Stepovich M. A.* Comparison of analytical and numerical modeling of distributions of nonequilibrium minority charge carriers generated by a wide beam of medium-energy electrons in a two-layer semiconductor structure // *J. Phys. Conf. Ser.* 2020. V. 1479. Article 012116; DOI: 10.1088/1742-6596/1479/1/012116
17. *Raftari B.* Self-consistence drift-diffusion-reaction model for the electron beam interaction with dielectric samples // *J. Appl. Phys.* 2015. V. 118. Article 204101; DOI: 10.1063/1.4936201
18. *Pavelchuk A. V., Maslovskaya A. G.* Simulation of delay reaction-drift-diffusion system applied to charging effects in electron-irradiated dielectrics // *J. Phys. Conf. Ser.* 2019. V. 1163. Article 012009; DOI: 10.1088/1742-6596/1163/1/012009
19. *Бризицкий Р. В., Максимова Н. Н., Масловская А. Г.* Теоретический анализ и численная реализация стационарной диффузионно-дрейфовой модели зарядки полярных диэлектриков // *Журн. вычисл. математики и мат. физики.* 2022. Т. 62, № 10. С. 1696–1706; DOI: 10.31857/S0044466922100039
20. *Борисов С. С., Грачев Е. А., Зайцев С. И.* Моделирование поляризации диэлектрика в процессе облучения электронным пучком // *Прикл. физика.* 2004. № 1. С. 118–123.
21. *Uchaikin M., Sibatov R.* Fractional kinetics in solids. Anomalous charge transport in semiconductors, dielectrics and nanosystems. Singapore: World Scientific, 2012.
22. *Holm S.* Natural occurrence of fractional derivatives in physics // *arXiv.* 2023; DOI: 10.48550/arXiv.2305.07074
23. *Deng W., Hou R., Wang W., Xu P.* Modeling Anomalous Diffusion. From Statistics to Mathematics. Singapore: World Scientific, 2020.
24. *Evangelista L. R., Lenzi E. K.* Fractional Diffusion Equations and Anomalous Diffusion. Cambridge: Cambridge University Press, 2018.
25. *Мейланов Р. П., Садыков С. А.* Фрактальная модель кинетики переключения поляризации в сегнетоэлектриках // *Журн. техн. физики.* 1999. Т. 69, № 5. С. 128–129.
26. *Galiyarova N. M.* Fractal dielectric response of multidomain ferroelectrics from the irreversible thermodynamics standpoint // *Ferroelectrics.* 1999. V. 222, N 1. P. 381–387; DOI: 10.1080/00150199908014841
27. *Ducharne B., Sebald G., Guyomar D.* Time fractional derivative for frequency effect in ferroelectrics // *Proc. 18th IEEE Internat. Sympos. Appl. Ferroelectr.* 2009. P. 1–4; DOI: 10.1109/ISAF.2009.5307619
28. *Wang X.* Analytical solitary wave solutions of a time-fractional thin-film ferroelectric material equation involving beta-derivative using modified auxiliary equation method // *Results Phys.* 2023. V. 48. Article 106411; DOI: 10.1016/j.rinp.2023.106411
29. *Moroz L. I., Masslovskaya A. G.* Numerical simulation of an anomalous diffusion process based on the higher-order accurate scheme // *Math. Models Comput. Simul.* 2021. V. 13, N 3. P. 492–501; DOI: 10.1134/S207004822103011X
30. *Maslovskaya A. G., Moroz L. I.* Time-fractional Landau–Khalatnikov model applied to numerical simulation of polarization switching in ferroelectrics // *Nonlinear Dyn.* 2023. V. 111. P. 4543–4557; DOI: 10.1007/s11071-022-08071-5
31. *Moroz L. I., Maslovskaya A. G.* Simulation of nonlinear pyroelectric response of ferroelectrics near phase transition: fractional differential approach // *Mater. Sci. Forum.* 2022. V. 992. P. 843–848; DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.992.843
32. *Орешкин П. Т.* Физика полупроводников и диэлектриков. М.: Высшая школа, 1977.

33. Joy D. C. Monte Carlo modeling for electron microscopy and microanalysis. N. Y.: Oxford University Press, 1995.
34. Meng R. Application of fractional calculus to modeling the non-linear behaviors of ferroelectric polymer composites: viscoelasticity and dielectricity // *Membranes*. 2021. V. 11. N 6. Article 409; DOI: 10.3390/membranes11060409
35. Amadou Y., Justin M., Hubert M. B., Betchewe G., Doka S. Y., Crepin K. T. Fractional effects on solitons in a 1D array of rectangular ferroelectric nanoparticles // *Waves Random Complex Media*. 2020. V. 30. P 581–592; DOI: 10.1080/17455030.2018.1546062
36. Guzelturk B., Yang T., Liu Y., Wei Ch.-Ch., Orenstein G., Trigo M., Zhou T., Diroll B. T., Holt M. V., Wen H., Chen L.-Q., Yang J.-Ch., Lindenberg A. M. Sub-nanosecond reconfiguration of ferroelectric domains in bismuth ferrite // *Adv. Mater.* 2023. V. 35. Article e2306029; DOI: 10.1002/adma.202306029
37. Liu F., Meerschaert M. M., McGough R. J., Zhuang P., Liu Q. Numerical methods for solving the multi-term time-fractional wave-diffusion equation // *Fract. Calc. Appl. Anal.* 2013. V. 16. P. 9–25; DOI: 10.2478/s13540-013-0002-2
38. Buckova Z., Ehrhardt M., Gunther M. Alternating direction explicit methods for convection diffusion equations // *Acta Math. Univ. Comenianae*. 2015. V. 84, N 2. P. 309–325.

UDC 519.63

A FRACTIONAL-DIFFERENTIAL APPROACH TO NUMERICAL SIMULATION OF ELECTRON-INDUCED CHARGING OF FERROELECTRICS

© 2024 L. I. Moroz^a, A. G. Maslovskaya^b*Amur State University, Blagoveshchensk, 675028 Russia*E-mails: ^alubovep@mail.ru, ^bmaslovskayaag@mail.ru

Received 04.09.2023, revised 01.02.2024, accepted 07.02.2024

Abstract. The paper proposes a fractional-differential modification of the mathematical model of the process of nonstationary charging of polar dielectric materials under conditions of irradiation with medium-energy electron beams. The mathematical formalization is based on a spherically symmetric diffusion-drift equation with a fractional time derivative. An implicit finite-difference scheme is constructed using the Caputo derivative approximation. An application program has been developed in *Matlab* software that implements the designed computational algorithm. Verification of an approximate solution of the problem is demonstrated using a test example. The results of computational experiments to evaluate the characteristics of field effects of injected charges in ferroelectrics when varying the order of fractional differentiation in subdiffusion regimes are presented.

Keywords: electron-induced charging, ferroelectric, fractional partial differential equation, Caputo derivative, implicit finite-difference scheme, computational experiment.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.105

REFERENCES

1. D. Otten, *Mathematical Models of Reaction Diffusion Systems, Their Numerical Solutions and the Freezing Method with Comsol Multiphysics* (Bielefeld Univ., Bielefeld, 2000).
2. S. V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow* (Hemisphere Publ., Washington, 1980).
3. A. A. Samarskii and P. N. Vabishchevich, *Numerical Methods for Solving Convection–Diffusion Problems* (LIBROKOM, Moscow, 2015) [in Russian].
4. T. Kan and M. Suzuki, “Uniform estimates and uniqueness of stationary solutions to the drift–diffusion model for semiconductors,” *Appl. Anal.* **5** (10), 1799–1810 (2019). <https://doi.org/10.1080/00036811.2018.1460820>
5. S. S. Rekhviashvili and A. A. Alikhanov, “Simulation of drift-diffusion transport of charge carriers in semiconductor layers with a fractal structure in an alternating electric field,” *Semiconductors* **51**, 755–759 (2017). <https://doi.org/10.1134/S1063782617060264>
6. J. He, S. H. Tang, Y. Q. Qin, P. Dong, H. Z. Zhang, C. H. Kang, W. X. Sun, and Z. X. Shen, “Two-dimensional structures of ferroelectric domain inversion in LiNbO₃ by direct electron beam lithography,” *J. Appl. Phys.* **93**, 9943–9947 (2003). <https://doi.org/10.1063/1.1575918>
7. L. S. Kokhanchik and D. V. Irzhak, “Formation of regular domain structures and peculiarities of switching of the spontaneous polarization in lithium tantalate crystals during discrete electron irradiation,” *Phys. Solid State* **52**, 306–310 (2010).
8. É. I. Rau, E. N. Evstaf’eva, and M. V. Andrianov, “Mechanisms of charging of insulators under irradiation with medium-energy electron beams,” *Phys. Solid State* **50**, 621–630 (2008).

9. D. S. Chezganov, D. K. Kuznetsov, and V. Ya. Shur, "Simulation of spatial distribution of electric field after electron beam irradiation of MgO-doped LiNbO₃ covered by resist layer," *Ferroelectrics* **496**, 70–78 (2016). <https://doi.org/10.1080/00150193.2016.1157436>
10. D. S. H. Chan, K. S. Sim, and J. C. H. Phang, "A simulation model for electron irradiation induced specimen charging in a scanning electron microscope," *Scan. Microsc.* **7** (3), 847–859 (1993).
11. A. Melchiger and S. Hofmann, "Dynamic double layer model. Description of time dependent charging phenomena in insulators under electron beam irradiation," *J. Appl. Phys.* **78** (10), 6224–6232 (1995). <https://doi.org/10.1063/1.360569>
12. J. Cazaux, "About the mechanisms of charging in EPMA, SEM, and ESEM with their time evolution," *Microsc. Microanal.* **10** (6), 670–680 (2004). <https://doi.org/10.1017/s1431927604040619>
13. M. Kotera, K. Yamaguchi, and H. Suga, "Dynamic simulation of electron-beam-induced charging up of insulators," *Jpn. J. Appl. Phys.* **38** (12S), 7176–7179 (1999). <https://doi.org/10.1143/JJAP.38.7176>
14. K. Ohya, K. Inai, H. Kuwada, T. Hauashi, and M. Saito, "Dynamic simulation of secondary electron emission and charging up of an insulating material," *Surf. Coat. Technol.* **202**, 5310–5313 (2008). <https://doi.org/10.1016/j.surfcoat.2008.06.008>
15. A. Maslovskaya and A. Pavelchuk, "Simulation of dynamic charging processes in ferroelectrics irradiated with SEM," *Ferroelectrics* **476** (2), 157–167 (2015). <https://doi.org/10.1080/00150193.2015.998111>
16. V. V. Kalmanovich, E. V. Seregina, and M. A. Stepovich, "Comparison of analytical and numerical modeling of distributions of nonequilibrium minority charge carriers generated by a wide beam of medium-energy electrons in a two-layer semiconductor structure," *J. Phys. Conf. Ser.* **1479**, 012116 (2020). <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1479/1/012116>
17. B. Raftari, "Self-consistence drift-diffusion-reaction model for the electron beam interaction with dielectric samples," *J. Appl. Phys.* **118**, 204101 (2015). <https://doi.org/10.1063/1.4936201>
18. A. V. Pavelchuk and A. G. Maslovskaya, "Simulation of delay reaction-drift-diffusion system applied to charging effects in electron-irradiated dielectrics," *J. Phys. Conf. Ser.* **1163**, 012009 (2019). <https://doi.org/10.1088/1742-6596/1163/1/012009>
19. R. V. Brizitskii, N. N. Maksimova, and A. G. Maslovskaya, "Theoretical analysis and numerical implementation of a stationary diffusion-drift model of polar dielectric charging," *Comput. Math. Math. Phys.* **62** (10), 1680–1690 (2022). <https://doi.org/10.1134/S0965542522100037>
20. S. S. Borisov, E. A. Grachev, and S. I. Zaitsev, "Modeling the polarization of a dielectric during irradiation with an electron beam," *Prikl. Fiz.* (1), 118–123 (2004) [in Russian].
21. M. Uchaikin and R. Sibatov, *Fractional Kinetics in Solids. Anomalous Charge Transport in Semiconductors, Dielectrics and Nanosystems* (World Sci., Singapore, 2012).
22. S. Holm, "Natural occurrence of fractional derivatives in physics," *arXiv* (2023). <https://doi.org/10.48550/arXiv.2305.07074>
23. W. Deng, R. Hou, W. Wang, and P. Xu, *Modeling Anomalous Diffusion. From Statistics to Mathematics* (World Sci., Singapore, 2020).
24. L. R. Evangelista and E. K. Lenzi, *Fractional Diffusion Equations and Anomalous Diffusion* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2018).
25. R. P. Meilanov and S. A. Sadykov, "Fractal model of polarization switching kinetics in ferroelectrics," *Zh. Tekh. Fiz.* **69** (5), 128–129 (1999) [in Russian].
26. N. M. Galiyarova, "Fractal dielectric response of multidomain ferroelectrics from the irreversible thermodynamics standpoint," *Ferroelectrics* **222** (1), 381–387 (1999). <https://doi.org/10.1080/00150199908014841>
27. B. Ducharne, G. Sebald, and D. Guyomar, "Time fractional derivative for frequency effect in ferroelectrics," *Proc. 18th IEEE Int. Symp. Appl. Ferroelectr.* (2009), 1–4. <https://doi.org/10.1109/ISAF.2009.5307619>
28. X. Wang, "Analytical solitary wave solutions of a time-fractional thin-film ferroelectric material equation involving beta-derivative using modified auxiliary equation method," *Results Phys.* **48**, 106411 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.rinp.2023.106411>

29. L. I. Moroz and A. G. Maslovskaya, “Numerical simulation of an anomalous diffusion process based on the higher-order accurate scheme,” *Math. Models Comput. Simul.* **13** (3), 492–501 (2021). <https://doi.org/10.1134/S207004822103011X>
30. A. G. Maslovskaya and L. I. Moroz, “Time-fractional Landau–Khalatnikov model applied to numerical simulation of polarization switching in ferroelectrics,” *Nonlinear Dyn.* **111**, 4543–4557 (2023). <https://doi.org/10.1007/s11071-022-08071-5>
31. L. I. Moroz and A. G. Maslovskaya, “Simulation of nonlinear pyroelectric response of ferroelectrics near phase transition: Fractional differential approach,” *Mater. Sci. Forum* **992**, 843–848 (2022). <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/MSF.992.843>
32. P. T. Oreshkin, *Physics of Semiconductors and Dielectrics* (Vyssh. Shkola, Moscow, 1977) [in Russian].
33. D. C. Joy, *Monte Carlo Modeling for Electron Microscopy and Microanalysis* (Oxford Univ. Press, New York, 1995).
34. R. Meng, “Application of fractional calculus to modeling the non-linear behaviors of ferroelectric polymer composites: viscoelasticity and dielectricity,” *Membranes* **11** (6), 409 (2021). <https://doi.org/10.3390/membranes11060409>
35. Y. Amadou, M. Justin, M. B. Hubert, G. Betchewe, S. Y. Doka, and K. T. Crepin, “Fractional effects on solitons in a 1D array of rectangular ferroelectric nanoparticles,” *Waves Random Complex Media* **30**, 581–592 (2020). <https://doi.org/10.1080/17455030.2018.1546062>
36. B. Guzelturk, T. Yang, Y. Liu, Ch.-Ch. Wei, G. Orenstein, M. Trigo, T. Zhou, B. T. Diroll, M. V. Holt, H. Wen, L.-Q. Chen, J.-Ch. Yang, and A. M. Lindenberg, “Sub-nanosecond reconfiguration of ferroelectric domains in bismuth ferrite,” *Adv. Mater.* **35**, e2306029 (2023). <https://doi.org/10.1002/adma.202306029>
37. F. Liu, M. M. Meerschaert, R. J. McGough, P. Zhuang, and Q. Liu, “Numerical methods for solving the multi-term time-fractional wave-diffusion equation,” *Fract. Calc. Appl. Anal.* **16**, 9–25 (2013). <https://doi.org/10.2478/s13540-013-0002-2>
38. Z. Buckova, M. Ehrhardt, and M. Gunther, “Alternating direction explicit methods for convection diffusion equations,” *Acta Math. Univ. Comenianae* **84** (2), 309–325 (2015).

УДК 534.8

МЕТОД РАСЧЁТА УЛЬТРАЗВУКОВОЙ КОАГУЛЯЦИИ ЧАСТИЦ РАЗМЕРОМ МЕНЕЕ 2.5 МКМ В ТРЁХМЕРНЫХ ВИХРЕВЫХ И ТУРБУЛЕНТНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ТЕЧЕНИЯХ

© 2024 В. Н. Хмелёв^a, А. В. Шалунов^b, Р. Н. Голых^c

*Бийский технологический институт (филиал) АлтГТУ им. И. И. Ползунова,
ул. им. Героя Советского Союза Трофимова, 27, г. Бийск 659305, Россия*

E-mails: ^avnh@bti.secna.ru, ^bshalunov@bti.secna.ru, ^cromangl90@gmail.com

Поступила в редакцию 03.09.2023 г.; после доработки 21.11.2023 г.;
принята к публикации 07.02.2024 г.

Предложен метод расчёта кинетики ультразвуковой коагуляции РМ2.5 при тонкой газоочистке, который обеспечивает на порядок более высокую производительность расчётов. Повышение производительности обеспечивается за счёт предложенного и обоснованного способа сведения исходной трёхмерной задачи к двумерной. Предложенный способ сведения основан на том, что время полного оборота вихревых акустических течений оказывается много меньшим характерного времени коагуляции при тонкой очистке газов. Это позволило представить фракционный состав аэрозольных частиц в качестве зависимости от двух функций тока вместо трёх координат. Проведённые расчёты с помощью предложенного метода позволили выявить возможность повышения эффективности коагуляции в трёхмерных течениях за счёт следующих механизмов: локального повышения концентрации, вызванного инерционным переносом частиц к периферии трёхмерных вихрей в газовой фазе; повышения частоты столкновений частиц за счёт трёхмерных турбулентных возмущений в ультразвуковых полях с высокой амплитудой колебательной скорости (более 10 м/с); повышения производительности и обеспечения возможности непрерывной реализации процесса в проточном режиме за счёт переноса частиц между линиями тока основных вихрей, инициированных ультразвуковыми колебаниями, а также за счёт внешних течений, перпендикулярных плоскости вихрей в трёхмерном пространстве. Разработанный комплекс программ для реализации расчётов может быть использован при проектировании газоочистного оборудования.

Ключевые слова: ультразвук, коагуляция, вихри, трёхмерное пространство, турбулентность, линия тока.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.106

ВВЕДЕНИЕ

На сегодняшний день ежегодно в атмосферу поступает более 150 млн. тонн загрязняющих веществ в высокодисперсном состоянии природного и техногенного происхождения. Особую опасность представляют РМ2.5, которые способны непосредственно проникать в кровь человека через альвеолы лёгких, вызывая различные заболевания [1, 2]. Благодаря развитию средств обнаружения наличия частиц РМ2.5 в воздухе опасные частицы обнаруживаются в местах, ранее считавшихся свободными от них [3, 4]. Поскольку эффективность существующих пылеуловителей для РМ2.5 сводится к нулю, требуется решать проблему укрупнения частиц. Один из наиболее эффективных способов укрупнения частиц — принудительная ультразвуковая коагуляция аэрозолей [5, 6]. Однако ультразвуковая коагуляция является эффективной лишь, начиная с размеров частиц 5–10 мкм и более.

Для обеспечения эффективности ультразвуковой коагуляции РМ2.5, проанализировав различные физические механизмы процесса [7, 8], ранее авторами был предложен подход [9],

который заключается в создании специальных условий (по геометрии озвучиваемого газового промежутка) для интенсивного проявления вихревых акустических течений, когда нормальное ускорение постоянной составляющей течения газа оказывается сопоставимым с ускорениями, реализуемыми в промышленных циклонах.

Данный фактор обеспечивает локальное повышение концентрации из-за ненулевой инерционности частиц (частицы перемещаются к периферии вихря) и, следовательно, повышение эффективности ультразвуковой коагуляции. Кроме того, за счёт дополнительной турбулизации потока [10] возникает дисперсия скоростей частиц, близких по размерам и локализации, которая вносит вклад в повышения эффективности. Существующие физико-математические модели, позволяющие наиболее полно учесть данные факторы, основаны на отслеживании движения отдельных групп частиц в течение каждого периода внешних акустических возмущений (в данном случае ультразвуковых колебаний) [11, 12]. Однако такие модели, реализованные в популярных программных пакетах, отличаются крайне высокой вычислительной трудоёмкостью из-за:

- трёхмерной постановки задачи;
- необходимости отслеживания движения каждой отдельной группы частиц в течение всего периода колебаний;
- необходимости отслеживания движения частиц не только в ламинарной, но и в турбулентной составляющей потока.

Однако в рассматриваемой задаче ультразвуковой коагуляции, время полного оборота которых вокруг оси вихря может быть гораздо меньшим, чем характерное время между актами столкновения частиц. Это даёт возможность рассматривать движение частиц вдоль отдельной трубки тока вихря как единое целое и сокращать размерность задачи. Поэтому возможно и целесообразно разрабатывать менее ресурсозатратные постановку задачи и метод расчёта ультразвуковой коагуляции PM2.5 в трёхмерных вихревых и турбулентных акустических течениях.

Теоретическое обоснование формулируемой математической постановки задачи и разрабатываемого метода расчёта описано в следующих разделах.

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ТРЁХМЕРНОЙ ЗАДАЧИ РАСЧЁТА УЛЬТРАЗВУКОВОЙ КОАГУЛЯЦИИ АЭРОЗОЛЕЙ В ВИХРЕВЫХ И ТУРБУЛЕНТНЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ТЕЧЕНИЯХ

Конечной целью исследования модели ультразвуковой коагуляции является изучение влияния трёхмерных акустических течений на эффективность коагуляции частиц, определяемую по усреднённой концентрации частиц на сечении выходе озвучиваемого объёма (чем меньше концентрация, тем выше эффективность) согласно следующему выражению:

$$\xi = \left(1 - \frac{n_{out}(\mathbf{P})}{n_{in}}\right) \cdot 100\%, \quad \mathbf{P} = (\Omega, A_n, \rho, \alpha, \omega, c, \rho_p, \mu, \zeta, d_0),$$

где n_{out} и n_{in} — усреднённые концентрации частиц на выходе и входе озвучиваемого объёма соответственно, $[м^{-3}]$; $\mathbf{P}$ — вектор параметров акустического воздействия, расчётной области и газодисперсной среды.

Физические величины, входящие в вектор $\mathbf{P}$, определяются следующим образом: $\Omega \subset R^3$ — связное компактное множество точек расчётной области; A_n — функция распределения амплитуд колебаний по границе расчётной области $\partial\Omega$, $A_n : \partial\Omega \rightarrow R$; ρ — плотность газовой фазы, $[кг/м^3]$; α — коэффициент поглощения ультразвуковых колебаний в газовой фазе, $[м^{-1}]$; ρ_p — плотность вещества дисперсной фазы, $[кг/м^3]$; ω — частота ультразвуковых колебаний, $[с^{-1}]$; c — скорость звука в газовой фазе, $[м/с]$; μ — динамическая вязкость газовой фазы, $[Па \cdot с]$;

ξ — кинематическая вязкость газовой фазы, [Па·с]; d_0 — минимальный диаметр дисперсной частицы, [м].

В рамках модели рассматривается эволюция газодисперсной среды в области Ω . Среда характеризуется концентрациями частиц различных типоразмеров $n_k(\mathbf{r}, t)$ ($\iiint_V n_k(\mathbf{r}, t) dV$ — количество частиц условного диаметра $k^{\frac{1}{3}}d_0$ в момент времени t в объёме $V \subset \Omega$; $\mathbf{r}$ — вектор координат, [м]; t — время, [с]).

При трёхмерном численном моделировании ультразвуковой коагуляции аэрозолей в вихревых и турбулентных акустических течениях принимаются следующие допущения:

1. Вихревые акустические течения содержат две составляющие:

- ламинарная составляющая $\mathbf{u}$;
- турбулентная составляющая U_T с амплитудой турбулентных пульсаций $U_{T,A}$.

Ламинарная составляющая обусловлена наличием дрейфа газовой фазы из-за поглощения ультразвуковых колебаний в объёме. Ламинарная составляющая акустических течений определяется моделью, описанной в монографии [13].

Турбулентная составляющая инициируется основной колебательной скоростью, которая многократно превышает скорость ламинарной составляющей и равняется нескольким десяткам метров в секунду при уровне звукового давления от 165 дБ и выше.

2. Ламинарные вихревые акустические течения являются стационарными. Указанное допущение обуславливается тем, что нарастание скорости акустических течений, возникающих за счёт поглощения энергии ультразвуковых колебаний, приводит к пропорциональному возрастанию силы вязкого трения, которая препятствует течению.

При этом поглощаемая энергия ультразвуковых колебаний включает в себя кинетическую составляющую — энергия, переходящая в кинетическую энергию газа, и тепловую составляющую — энергия, переходящая в тепло за счёт колебаний силы вязкого трения.

По мере нарастания скорости акустических течений, кинетическая составляющая поглощаемой энергии ультразвуковых колебаний уравнивается работой против сил вязкого трения в течениях.

3. В стационарном течении газовой фазы частицы дрейфуют с постоянной скоростью

$$\mathbf{u}_p = \mathbf{u}(\mathbf{r}_p(t)) - \tau_p (\mathbf{u}, \nabla) \mathbf{u}|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_p(t)},$$

где τ_p — время релаксации частицы, [с]; $\mathbf{u}$ — скорость движения частицы, [м/с].

Указанное допущение обосновывается путём разложения скорости движения частицы по малому параметру и его подстановки в уравнение движения, которое согласно предлагаемой постановке задачи описывает вовлечение частицы в стационарные вихревые течения газа:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_p(t) &= \sum_{k=0}^{\infty} \mathbf{u}_{p,k}(t) \left(\frac{\tau_p}{T} \right)^k, \\ \frac{d\mathbf{u}_p(t)}{dt} &= \frac{\mathbf{u}(\mathbf{r}_p(t), t) - \mathbf{u}_p(t)}{\tau_p}, \end{aligned}$$

где t — время, [с]; $\mathbf{u}_p$ — скорость частицы, [м/с]; τ_p — время релаксации частицы, [с]; T — период ультразвуковых колебаний, [с]; $\mathbf{r}_p$ — вектор координат частицы, [м]; $\mathbf{u}$ — скорость стационарного течения газовой фазы в точке с координатой t .

При размере частиц не более 2.5 мкм отношение

$$\frac{\tau_p}{T} = \frac{\omega \tau_p}{2\pi} = \frac{\omega \rho d^2}{36\pi\mu} \approx \frac{1.38 \cdot 10^5 \cdot 1.22 \cdot 6.25 \cdot 10^{-12}}{100 \cdot 17 \cdot 10^{-6}} \ll 1.$$

Таким образом, достаточно ограничиться слагаемым разложения по первой степени времени релаксации:

$$\mathbf{u}_p = \mathbf{u}(\mathbf{r}_p(t)) - \tau_p(\mathbf{u}, \nabla) \mathbf{u}.$$

4. Характерное время коагуляции частиц превышает время полного оборота частицы вокруг линии тока. Указанное допущение обусловлено малой концентрацией частиц, когда речь идёт о тонкой газоочистке.

5. Характерное время перехода частиц между линиями тока ламинарного вихревого течения много больше времени полного оборота вокруг линии тока.

6. Как следствие допущений 4, 5, концентрация частиц в пределах одной линии тока может считаться одинаковой и вклады инерционного переноса частиц и коагуляции между собой являются аддитивными.

7. Турбулентные движения газа допустимо учесть в вероятности столкновения и их вклад в вероятность допустимо определять согласно полученному выражению

$$\begin{aligned} \beta_{i,j}(\|\mathbf{U}(\mathbf{r})\|) &= \beta_{H,i,j}(\|\mathbf{U}(\mathbf{r})\|) + \beta_{O,i,j}(\|\mathbf{U}(\mathbf{r})\|) = \\ &= \frac{\pi \rho U^2(\mathbf{r}) d_0 i^{\frac{2}{3}} j^{\frac{2}{3}}}{16\mu \left(i^{\frac{1}{3}} + j^{\frac{1}{3}}\right)} + \frac{U_{T,A}(U(\mathbf{r})) n(d_1) n(d_2) (d_1 + d_2)^2}{12\pi^2}. \end{aligned} \quad (1)$$

Выражение (1) состоит из 2-х слагаемых. Первое слагаемое $\beta_{H,i,j}(\|\mathbf{U}(\mathbf{r})\|)$ характеризует гидродинамическое взаимодействие частиц, которое вызвано силой Бьеркнеса [7]. Второе слагаемое $\beta_{O,i,j}(\|\mathbf{U}(\mathbf{r})\|)$ определяет столкновение частиц за счёт хаотичных турбулентных пульсаций. Выражение получено на основании модели Зоммерфельда, определяющей вероятность столкновения частиц, движущихся друг относительно друга с определённой скоростью. При этом предполагалось, что все возможные ориентации турбулентной составляющей скорости равновероятны. Это связано с высокочастотностью и хаотичностью пульсаций, а также их прямой зависимостью от скорости движения газа в текущий момент времени.

Поэтому математическая постановка начально-краевой задачи будет сформулирована на базе модели ламинарных акустических течений, которые определяют направление движения аэрозоля. В то время как турбулентные пульсации задают недетерминированные возмущения движения аэрозоля и повышают вероятности столкновения между частицами в локальных ансамблях, которые за счёт ламинарных течений тем не менее будут двигаться в определённых направлениях.

Для моделирования ламинарных вихревых акустических течений использовалось уравнение динамики несжимаемого газа под действием эквивалентной внешней силы, вызванной поглощением акустических колебаний. Эквивалентная объёмная внешняя сила определяется согласно выражению, приведённому в работах [9, 13].

Далее предлагается подход, который предназначен для сведения задачи от 3-х к двумерной.

1.1. Сокращение размерности начально-краевой задачи ультразвуковой коагуляции аэрозоля в акустических течениях

Как уже говорилось, сокращение размерности задачи возможно на основании допущения об одинаковости концентраций вдоль линии тока. Способ сокращения размерности задачи основан на представлении скорости течения газа в виде векторного произведения градиентов двух функций тока E и H [14, 15]:

$$\mathbf{u} = (\nabla E \times \nabla H).$$

Функция E имеет размерность $[\text{м}^2/\text{с}]$; функция H имеет размерность $[\text{м}]$. Пара величин E и H однозначно идентифицирует линию тока в трёхмерном вихре. Согласно принятому

допущению об одинаковости концентраций вдоль линии тока, концентрация аэрозольного облака может быть определена как функция от двух переменных E , H : $n_k(\mathbf{r}, t) = n_k^{(E, H)}(\mathbf{r}, t) = (E(\mathbf{r}), H(\mathbf{r}), t)$ (в дальнейшем индексы E , H опускаются).

Для формулирования начально-краевой задачи в 2D-переменных E , H , t , проводится вывод уравнения эволюции концентраций частиц в следующей последовательности.

1. С использованием формулы Гаусса—Остроградского, свойства непрерывности функций $n_k(\mathbf{r}, t)$ и учётом произвольности объёма V общее интегральное уравнение баланса количества частиц в объёме V и потоков через границу объёма V представляется в дифференциальной форме:

$$\frac{dn_k}{dt} = -\operatorname{div}(n_k \mathbf{u}_{p,k}) + D_k \Delta n_k + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{k-1} \beta_{i,k-i} n_i n_{k-i} - \sum_{k=1}^{\infty} \beta_{i,k} n_i n_k, \quad (2)$$

где D_k — коэффициент броуновской диффузии частиц k -го типоразмера, $[\text{м}^2/\text{с}]$.

2. Далее проводится интегрирование уравнения (2) по трубкам тока малого сечения, ограниченными поверхностями тока. Каждая поверхность представляет собой множество замкнутых линий тока. В пределах каждой трубки тока осуществляется движение частиц, как показано на рис. 1.

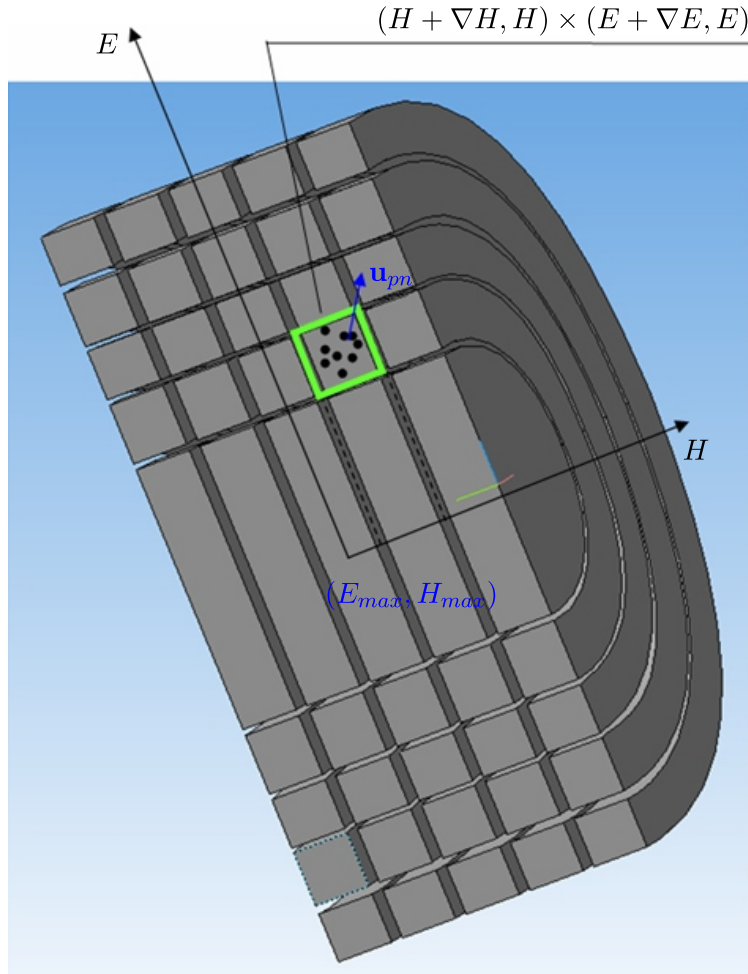


Рис. 1. Семейство трубок тока с частицами. $E_{\max}$, $H_{\max}$ — граничные значения функций тока в центре вихря, $\mathbf{u}_{pn}$ — скорость инерционного переноса частиц между линиями тока

3. Проводится доказательство интегрального тождества

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \frac{\int_{V(E,H,\epsilon)} f dV}{\int_{V(E,H,\epsilon)} dV} = \frac{\oint_{E=const, H=const} \frac{f}{\|\mathbf{u}\|} dl}{\oint_{E=const, H=const} \frac{1}{\|\mathbf{u}\|} dl}, \quad (3)$$

если f — непрерывная функция от трёхмерных координат и на всей линии тока ($E = const, H = const$) модуль скорости течения $\|\mathbf{u}\| > \alpha > 0$.

Для доказательства тождества (3) с учётом замкнутости линий тока в условии модели проводится переход к следующей системе координат: E, H — функции тока, который служат однозначным идентификатором линии; α — параметр, который определяет конкретную точку на линии тока и изменяется от 0 до 2π . Из условия замкнутости линии тока $\alpha = 0$ и $\alpha = 2\pi$ при равных E и H соответствуют одной и той же точке.

При этом переход от системы координат E, H, α к декартовой системе осуществляется согласно следующему выражению:

$$\mathbf{r}(\alpha, E, H) = \mathbf{r}_0 + A \begin{pmatrix} R(E, H, \alpha) \cos \alpha \\ R(E, H, \alpha) \sin \alpha \\ Z(E, H, \alpha) \end{pmatrix}.$$

Для учёта ориентации системы вихрей относительно лабораторной системы отсчёта вводится декартова система координат (X, Y, Z) , повернутая на постоянные углы относительно ЛСО (x, y, z) (A — матрица поворота).

В цилиндрической системе координат (R, Z, β) преобразование осуществляется следующим образом: $\begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R \cos \beta \\ R \sin \beta \\ Z \end{pmatrix}$, а линия тока задаётся как $\begin{pmatrix} R \\ Z \\ \beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R(E, H, \alpha) \\ Z(E, H, \alpha) \\ \alpha \end{pmatrix}$.

Далее, используя свойства частных производных функций тока и представленное преобразование системы координат, выражение для скорости течения газа представляется в следующем виде:

$$\|\mathbf{u}\| = \frac{1}{R} \left| \frac{\partial E}{\partial Z} \frac{\partial H}{\partial R} - \frac{\partial E}{\partial R} \frac{\partial H}{\partial Z} \right| \left| \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \alpha} \right|.$$

Исходя из данного выражения и якобиана преобразований объёмного интеграла по малой трубке тока, интеграл $\int_{V(E,H,\epsilon)} f dV$ представляется следующим образом

$$\int_{V(E,H,\epsilon)} f dV = \iint_{\sqrt{\frac{(E-E_0)^2}{c^2} + (H-H_0)^2} < \epsilon} \oint_{E=const, H=const} \frac{f}{\|\mathbf{u}\|} dl dE dH$$

для произвольной функции f .

При этом отмечается, что для произвольной линии тока, которая не находится на периферии или в центре вихря, выполняется неравенство $\|\mathbf{u}\| \geq C > 0$ вдоль всей линии тока. Если предположить, что такой константы C не существует, то для любого $\delta > 0$ существует точка на линии тока $\mathbf{r}_\delta$, для которой $\delta > \|\mathbf{u}(\mathbf{r}_\delta)\| \geq 0$. Далее, поскольку $\mathbf{r}_\delta$ является ограниченной последовательностью при $\delta = \frac{1}{n}$, где n — номер члена последовательности, то ввиду компактности множества точек линии тока существует точка $\mathbf{r}_\delta$, для которой $\mathbf{u}(\mathbf{r}_l) = 0$. Т. е. в данной точке имеет место быть разрыв линии тока. Получается противоречие. Таким образом, неравенство $\|\mathbf{u}\| \geq C > 0$ доказано.

Далее, используя свойства компактности множества V , равномерной непрерывности и ограниченности функций $\frac{f}{\|\mathbf{u}\|}$; $\frac{1}{\|\mathbf{u}\|}$ на линиях тока, не принадлежащих центру или периферии вихря, проводятся следующие оценки:

$$\begin{aligned} & \left| \oint_{(E,H)} \frac{f}{\|\mathbf{u}\|} dl - \oint_{(E_0,H_0)} \frac{f}{\|\mathbf{u}\|} dl \right| \leq \int_{(E,H)} (|E - E_0| + |H - H_0|) dl \times \\ & \times \left(\sup_{\alpha \in [0; 2\pi]} \left(\left| \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{f}{\|\mathbf{u}\|} \right) (E_0, H_0, \alpha) \right| \right) + \sup_{\alpha \in [0; 2\pi]} \left(\left| \frac{\partial}{\partial H} \left(\frac{f}{\|\mathbf{u}\|} \right) (E_0, H_0, \alpha) \right| \right) \right) + \\ & + \left| o \left(\sqrt{\frac{(E - E_0)^2}{c^2} + (H - H_0)^2} \right) \right| \int_{(E,H)} dl + M(E_0, H_0) \sqrt{\frac{(E - E_0)^2}{c^2} + (H - H_0)^2} \leq \\ & \leq M_3(E_0, H_0) \sqrt{\frac{(E - E_0)^2}{c^2} + (H - H_0)^2}. \end{aligned}$$

Указанные оценки справедливы для произвольной непрерывной функции f . Далее, используя представленные оценки, проводится доказательство искомого предельного соотношения:

$$\begin{aligned} & \left| \frac{\oint_{(E,H)} \frac{f}{\|\mathbf{u}\|} dl - \oint_{(E_0,H_0)} \frac{f}{\|\mathbf{u}\|} dl}{\sqrt{\frac{(E-E_0)^2}{c^2} + (H-H_0)^2}} \right| \leq M_{3,f}(E_0, H_0); \quad \left| \frac{\oint_{(E,H)} \frac{1}{\|\mathbf{u}\|} dl - \oint_{(E_0,H_0)} \frac{1}{\|\mathbf{u}\|} dl}{\sqrt{\frac{(E-E_0)^2}{c^2} + (H-H_0)^2}} \right| \leq M_{3,1}(E_0, H_0); \\ & \frac{\oint_{(E_0,H_0)} \frac{f}{\|\mathbf{u}\|} dl - M_{3,f}\epsilon}{\oint_{(E_0,H_0)} \frac{1}{\|\mathbf{u}\|} dl + M_{3,1}\epsilon} \leq \frac{\int \sqrt{\frac{(E-E_0)^2}{c^2} + (H-H_0)^2} \oint_{(E,H)} \frac{f}{\|\mathbf{u}\|} dl dE dH}{\int \sqrt{\frac{(E-E_0)^2}{c^2} + (H-H_0)^2} \oint_{(E,H)} \frac{1}{\|\mathbf{u}\|} dl dE dH} \leq \frac{\oint_{(E_0,H_0)} \frac{f}{\|\mathbf{u}\|} dl + M_{3,f}\epsilon}{\oint_{(E_0,H_0)} \frac{1}{\|\mathbf{u}\|} dl - M_{3,1}\epsilon}. \end{aligned}$$

Далее, ввиду того, что $M_{3,1}\epsilon$ и $M_{3,f}\epsilon$ стремятся к нулю при ϵ , стремящемся к нулю, и согласно лемме о зажатом пределе

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \frac{\int_{V(E,H,\epsilon)} f dV}{\int_{V(E,H,\epsilon)} dV} = \frac{\oint_{(E_0,H_0)} \frac{f}{\|\mathbf{u}\|} dl}{\oint_{(E_0,H_0)} \frac{1}{\|\mathbf{u}\|} dl}.$$

Что и требовалось доказать.

Далее, используя доказанное тождество, уравнение эволюции аэрозольного облака (2) преобразуется к следующему виду:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial n_k}{\partial t} - (\tau_k \langle ((\mathbf{u}, \nabla) \mathbf{u}, \nabla) E \rangle + D_k \langle \Delta E \rangle) \frac{\partial n_k}{\partial E} - \\ & - (\tau_k \langle ((\mathbf{u}, \nabla) \mathbf{u}, \nabla) H \rangle + D_k \langle \Delta H \rangle) \frac{\partial n_k}{\partial H} - \tau_k n_k \langle \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \rangle = \\ & = D_k \left(\langle \|\nabla E\|^2 \rangle \frac{\partial^2 n_k}{\partial E^2} + \langle \|\nabla H\|^2 \rangle \frac{\partial^2 n_k}{\partial H^2} \right) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{k-1} \langle \beta_{i,k-i} (\|\mathbf{U}(\mathbf{r})\|) \rangle n_i n_{k-i} - \\ & - \sum_{k=1}^{\infty} \langle \beta_{i,k} (\|\mathbf{U}(\mathbf{r})\|) \rangle n_i n_k, \end{aligned}$$

где знак усреднения $\langle \rangle$ означает $\langle g \rangle = \frac{\oint_{(E,H)} \frac{g}{\|\mathbf{u}\|} dl}{\oint_{(E,H)} \frac{1}{\|\mathbf{u}\|} dl}$.

Данное уравнение является нестационарным и решается в пространственно-временной области:

$$(t, E, H) \in [0; T_{max}) \times [E_{min}; E_{max}] \times [-L; 0],$$

где T_{max} — максимальное время расчёта, [с] (это время может быть как конечным положительным числом, так и равняться плюс бесконечности, если рассматривается стационарный процесс); E_{min} , E_{max} — граничные значения функции тока E , определяющей расстояние от линии тока до центра вихря, [м²/с]; L — протяжённость оси вихря, [м].

При этом в зависимости от направления движения вихря либо E_{min} соответствует центру вихря, а E_{max} — периферии; либо, наоборот, E_{min} — периферии, а E_{max} — центру. В непрерывном стационарном процессе эффективность коагуляции рассчитывается согласно следующему выражению:

$$E_{co} = 100\% \cdot \left(1 - \frac{S \text{ at } z=-L_{volume} \left(\sum_{k=1}^{\infty} n_k(E(\mathbf{r}), -L_{volume}) \right) dS}{n_0} \right).$$

При этом компонента скорости движения газовой фазы вдоль оси z определяется согласно следующему выражению:

$$u_z = \frac{P}{S},$$

где S — площадь сечения вихря, [м²].

Все дальнейшие сравнительные расчёты эффективности коагуляции при различных режимах воздействия и видах процесса проводились при постоянной производительности и начальной концентрации. Далее описан алгоритм численного решения поставленной начальной краевой задачи.

2. АЛГОРИТМ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ТРЁХМЕРНОЙ ЗАДАЧИ РАСЧЁТА УЛЬТРАЗВУКОВОЙ КОАГУЛЯЦИИ АЭРОЗОЛЕЙ В ВИХРЕВЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ТЕЧЕНИЯХ

Алгоритм численного решения трёхмерной начально-краевой задачи состоит из следующих шагов:

1. Вычисление акустического поля колебательных скоростей газовой фазы в озвучиваемом объёме.

2. Расчёт поля ламинарных вихревых акустических течений на основании численного решения уравнений Навье—Стокса итерационным методом [9].

3. Расчёт поля амплитуд турбулентных возмущений скорости.

4. Расчёт усреднений $\langle g \rangle = \frac{\oint_{(E,H)} \frac{g}{\|\mathbf{u}\|} dl}{\oint_{(E,H)} \frac{1}{\|\mathbf{u}\|} dl}$ при различных дискретных значениях функций тока E , H .

5. Полиномиальная аппроксимация усреднений

$$F_A = \{ \langle ((\mathbf{u}, \nabla) \mathbf{u}, \nabla) E \rangle; \langle ((\mathbf{u}, \nabla) \mathbf{u}, \nabla) H \rangle; \langle \Delta E \rangle; \langle \Delta H \rangle; \langle \sum_{i,j=1}^3 \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \rangle; \langle \|\nabla E\|^2 \rangle; \langle \|\nabla H\|^2 \rangle; \langle \|\mathbf{U}(\mathbf{r})\|^2 \rangle; \langle \|\mathbf{U}(\mathbf{r})\| \rangle \}$$

как функций от E , H .

6. Решение уравнения эволюции концентрации с использованием модели дискретной фазы.

Представленный алгоритм реализован в виде комплекса программ, состоящих из следующих программных модулей.

- Модуль расчёта течения газовой фазы, реализованный на языке FreeFEM++. Входные данные — геометрия озвучиваемого объёма, параметры колебаний излучателя и свойства газовой фазы. Выходные данные — распределение скоростей акустического течения и усреднения F_A при дискретных значениях E , H .
- Модуль расчёта ультразвуковой коагуляции, реализованный на языке FreeFEM++. Входные данные — граничные значения функций тока E , H ; параметры исходного аэрозоля; полиномиальные аппроксимации усреднений F_A .
- Модуль управления и визуализации, реализованный на языке Java SE. Он реализует пользовательский интерфейс для ввода исходных данных и визуализации графических зависимостей, осуществляет взаимодействие между модулями расчёта течения газовой фазы и полиномиальную аппроксимацию усреднений F_A , а также распараллеливание процесса вычислений (поскольку задача многофакторная, реализуется один из наиболее эффективных способов распараллеливания — распараллеливание по параметрам, при этом обеспечивается равномерная загрузка всех доступных потоков CPU с минимумом «простаиваний»).

Далее описаны результаты расчётов, полученные с помощью разработанного программного комплекса.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ТРЁХМЕРНОЙ ЗАДАЧИ РАСЧЁТА УЛЬТРАЗВУКОВОЙ КОАГУЛЯЦИИ АЭРОЗОЛЕЙ В ВИХРЕВЫХ АКУСТИЧЕСКИХ ТЕЧЕНИЯХ

Первоначально был установлен оптимальный размер воздушного промежутка, при котором скорость вихревых акустических течений максимальна, на основании расчёта акустического поля. Скорость вихревых акустических течений рассчитывалась на основании решения уравнений Навье—Стокса с эквивалентной объёмной силой, обуславливающей акустический дрейф газа. Объёмная сила определялась согласно выражению, приведённому в [13]. Этот размер соответствует половине длины ультразвуковой волны. Скорость течений в промежутке данного размера может достигать свыше 10 см/с при уровне звукового давления вблизи излучателя (когда излучение происходит в неограниченное пространство) 150 дБ.

Далее при установленном размере проведён численный анализ вклада каждого из исследуемых механизмов повышения эффективности ультразвуковой коагуляции — ламинарное течение и турбулентные возмущения. При численных расчётах рассматривалось модельное трёхмерное ламинарное течение, которое является спиралевидным.

Компоненты скорости такого спиралевидного течения, перпендикулярные оси «спирали», обеспечивают локальное уплотнение частиц за счёт инерционного переноса. А компонента скорости, параллельная оси «спирали», обеспечивает непрерывность реализации процесса. Турбулентное течение представляет собой хаотичные возмущения, возникающие при высоких амплитудах колебательных скоростей (более 6 м/с при уровнях звукового давления от 160 дБ). При таких скоростях число Рейнольдса составляет 7320, что более чем в 3 раза превышает критическое число Рейнольдса (2300), при котором возникают турбулентные явления.

Расчёт проводился при плотности газовой фазы 1,22 кг/м³; вязкости газовой фазы 17 Па·с; скорости звука в газовой фазе 343 м/с; частоте ультразвуковых колебаний 22 кГц. Коэффициент затухания звука в газе рассчитывался без учёта динамической вязкости. Толщина

воздушного промежутка соответствовала половине длины ультразвуковой волны 7,7 мм. Ширина промежутка составляла 20 мм (размер отдельного вихря).

Далее представлены зависимости (рис. 2) эффективности коагуляции от уровня звукового давления (максимального уровня, создаваемого в воздушном промежутке) при различных размерах частиц. Зависимости приведены для 3-х случаев:

I. Классическая ультразвуковая коагуляция в непрерывном режиме, когда осуществляется плоскопараллельный перенос частиц без трёхмерных течений. Такой перенос частиц обеспечивает только движение аэрозоля в заданном направлении и не вносит вклада эффективность коагуляции.

II. Ультразвуковая коагуляция в трёхмерном спиралевидном течении, когда вклад в повышение эффективности вносит локальное уплотнение частиц за счёт ламинарных вихревых движений газовой фазы. Турбулентное возмущение не учитывается.

III. Ультразвуковая коагуляция в трёхмерном турбулентном течении, когда на эффективность коагуляции влияет не только локальное уплотнение за счёт ламинарного течения, но и турбулентные хаотичные возмущения.

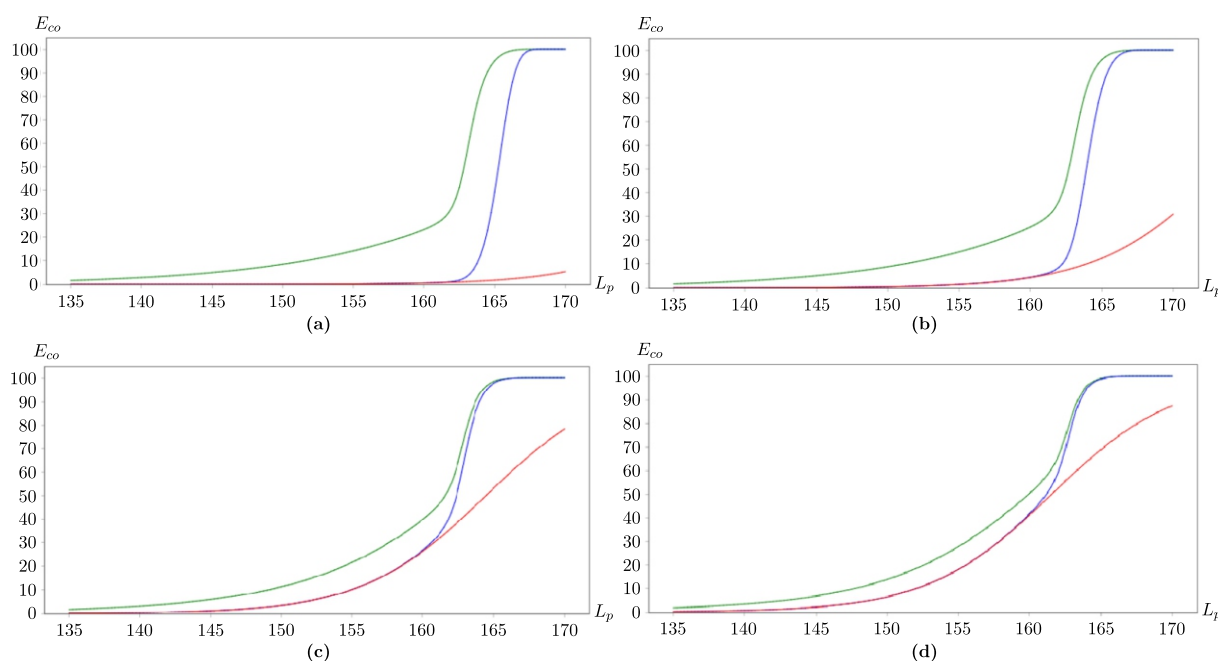


Рис. 2. Зависимости эффективности коагуляции E_{co} [%] от уровня звукового давления L_p [дБ] для частиц размером: (а) 0.6 мкм, (б) 1.2 мкм, (с) 2.4 мкм, (д) 3.0 мкм. Красная линия — классическая ультразвуковая коагуляция в непрерывном режиме, синяя линия — ультразвуковая коагуляция в трёхмерном спиралевидном течении, зелёная линия — ультразвуковая коагуляция в трёхмерном турбулентном течении

Как следует из представленных рисунков, эффективность классической ультразвуковой коагуляции РМ2.5 (включая частицы размером от 2.5 до 3 мкм) не превышает 85% даже при уровне звукового давления 170 дБ. На практике, при более высоком уровне звукового давления возможно снижение эффективности коагуляции за счёт вторичного разрушения агломератов. Практически для всех частиц из диапазона размеров 0.6–3 мкм существует критический уровень звукового давления, начиная с которого в эффективность коагуляции вносят вклад трёхмерные ламинарные течения. Этот уровень звукового давления находится в диапазоне от 160 дБ до 165 дБ.

Его существование обусловлено тем, что при более низких уровнях звукового давления замедляется скорость инерционного переноса частиц, пропорциональная 6-й степени амплитуды

колебательной скорости (скорость вихревых течений пропорциональна 2-й степени амплитуды колебательной скорости, поскольку это является нелинейным эффектом 2-го порядка, а скорость инерционного переноса пропорциональна кубу скорости вихревого течения (векторное произведение ускорения движения газа на скорость)). В то время как вероятность столкновения частиц пропорциональна квадрату амплитуды колебательной скорости. Т. е. при малых уровнях звукового давления инерционный перенос происходит гораздо медленнее ультразвуковой коагуляции.

За счёт инерционного переноса уже при уровне звукового давления 163 дБ эффективность коагуляции частиц 2.5 мкм достигает практически 100%, а при уровне звукового давления от 168 дБ эффективно коагулируют частицы размером от 0.6 мкм. Дополнительный вклад турбулентных возмущений снижает до 163 дБ уровень звукового давления, необходимый для коагуляции мелких частиц. Это подтверждает необходимость учёта данного фактора для повышения эффективности коагуляции частиц 1 мкм и менее.

Далее приведены зависимости эффективности ультразвуковой коагуляции от концентрации аэрозоля (рис. 3).

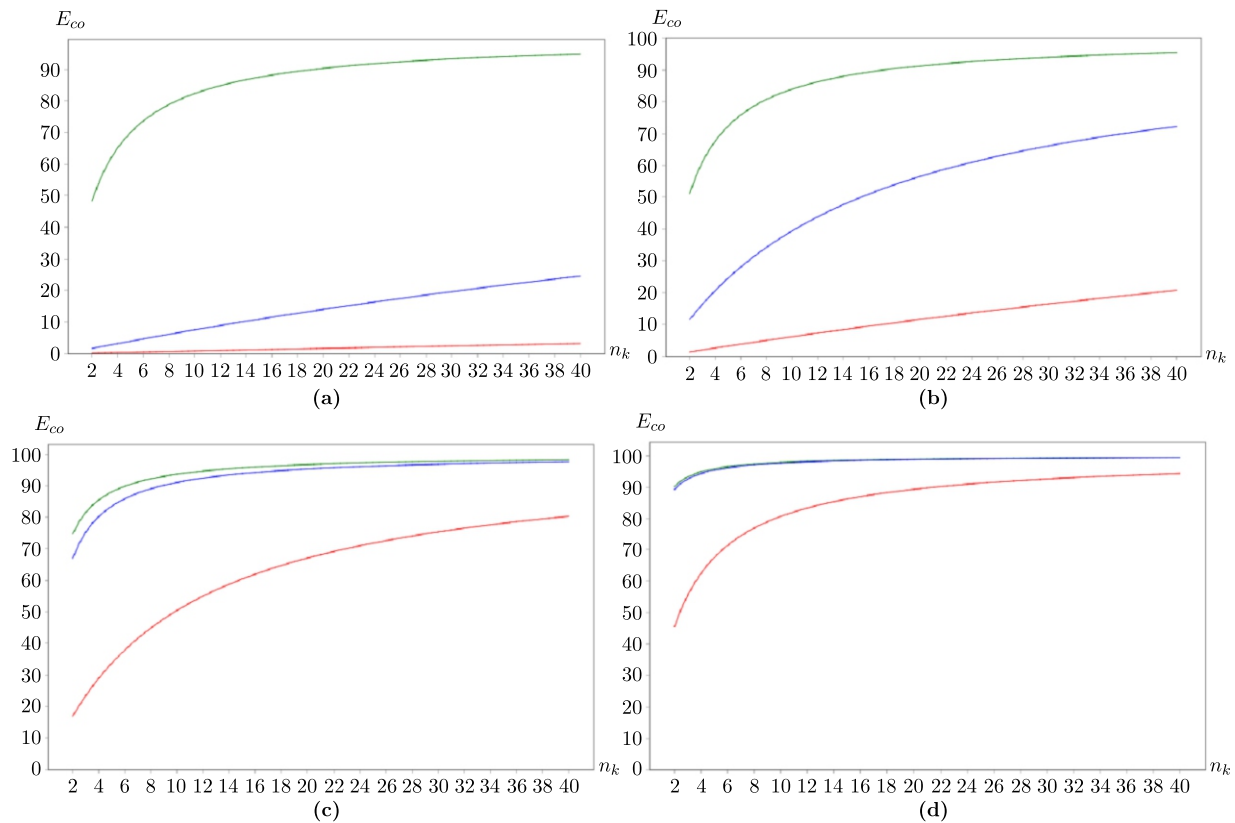


Рис. 3. Зависимости эффективности коагуляции E_{co} [%] от концентрации n_k [$\cdot 10^{11} \text{ м}^3$] для частиц размером: (а) 0.5 мкм, (б) 1.0 мкм, (с) 2.5 мкм, (д) 4.0 мкм. Красная линия — классическая ультразвуковая коагуляция в непрерывном режиме, синяя линия — ультразвуковая коагуляция в трёхмерном спиральном течении, зелёная линия — ультразвуковая коагуляция в трёхмерном турбулентном течении

Согласно представленным зависимостям, наличие трёхмерных турбулентных пульсаций позволяет достичь эффективности коагуляции не менее 50% для массовой концентрации частиц не более 20 мг на 1 м^3 (при частицах размером 0.5 мкм и счётной концентрации порядка 10^{11} м^{-3}).

При этом наличие трёхмерных вихревых ламинарных течений и трёхмерных турбулентных пульсаций позволяет достичь эффективность коагуляции не менее 90% при пониженных

концентрациях. Так, например, для размера частиц 1 мкм эффективность коагуляции за счёт турбулентных пульсаций достигает 90% при счётной концентрации порядка 10^{12} м^{-3} . В свою очередь ультразвуковая коагуляция без учёта вихревых течений не обеспечивает 20%-ной эффективности при в 2 раза большей концентрации.

При размерах частиц 2.5 мкм при счётной концентрации $4 \cdot 10^{12} \text{ м}^{-3}$ эффективность классической УЗ коагуляции обеспечивается на уровне 70%. Турбулентные пульсации+ламинарные вихревые течения позволяют достичь эффективности 90% при в 2 раза меньшей концентрации. Полученные зависимости позволяют установить высокую эффективность ультразвуковой коагуляции с инициированием вихревых турбулентных течений в широком диапазоне концентраций.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполненных исследований разработана модель и численный метод расчёта эффективности ультразвуковой коагуляции в 3D-ламинарных и турбулентных течениях с созданными резонансными условиями для возникновения таких течений.

Предложенный, математически и физически обоснованный численный метод расчёта позволяет свести 3-х мерную задачу к 2D, тем самым на порядок сократив время расчёта, и за обозримое время получить зависимости эффективности коагуляции от различных параметров. Предложенный метод реализован в виде комплекса программ. Результаты численного расчёта с помощью созданных программ позволили установить:

- граничные уровни звукового давления, при которых оказывают влияние различные виды течений в трёхмерном пространстве. Ламинарные вихревые течения начинают оказывать влияние (за счёт локального уплотнения аэрозольного облака, связанного с силами инерции) начиная с уровня звукового давления 160–165 дБ, а турбулентные возмущения вносят дополнительный вклад в диапазоне уровней звукового давления от 140 до 170 дБ;

- факт в том, наличие трёхмерных турбулентных возмущений приводит к тому, что эффективность коагуляции достигает практически 100% при уровне звукового давления, на 5 дБ ниже, чем при только ламинарных течениях (или при амплитуде звукового давления, в 3 раза более низкой, чем требуемой для 100%-ной эффективности коагуляции при ламинарных течениях).

Проведённое исследование и полученные результаты служат научным обоснованием повышения эффективности ультразвуковой коагуляции за счёт создания условий для возникновения трёхмерных ламинарных и турбулентных вихревых акустических течений.

Созданный комплекс программ может быть использован для инженерного расчёта практических конструкций газоочистных устройств с ультразвуковой коагуляцией в вихревых и турбулентных акустических течениях с целью определения размеров озвучиваемого объёма и режимов воздействия для достижения требуемой степени очистки газа при заданных характеристиках очищаемой газодисперсной среды.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 19-19-00121; <https://rscf.ru/project/19-19-00121/>). Других источников финансирования проведения или руководства данным конкретным исследованием не было.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ma Y., Zang E., Liu Y., Lu Y., Krumholz H., Bell M., Chen K. Wildfire smoke PM2.5 and mortality in the contiguous United States // medRxiv. 2023; DOI: 10.1101/2023.01.31.23285059
2. Ihsan I., Oktivia R., Anjani R., Xahroh N. Health risk assessment of PM2.5 and PM10 in KST BJ Habibie, South Tangerang, Indonesia // IOP Conf. Ser. Materials Sci. Engrg. 2023. V. 1201. Article 012033; DOI: 10.1088/1755-1315/1201/1/012033
3. Park D., Kim T., Kang K. Black Carbon and PM2.5 impact analysis in an urban school // E3S Web Conf. 2023. V. 396. Article 01056; DOI: 10.1051/e3sconf/202339601056
4. Torkmahalleh M. A., Turganova K., Zhigulina Z., Madiyarova T., Adotey E. K., Malekipirbazari M., Buonanno G., Stabile L. Formation of cluster mode particles (1–3 nm) in preschools // Sci. Total Environ. 2022. V. 818. Article 151756; DOI: 10.1016/j.scitotenv.2021.151756
5. Riera E., Gonzalez-Gomez I., Rodriguez G., Gallego-Juarez J. Ultrasonic agglomeration and preconditioning of aerosol particles for environmental and other applications // Power Ultrasonics (Second Edition). 2023. P. 861–886; DOI: 10.1016/B978-0-12-820254-8.00029-4
6. Moldavsky L., Gutfinger C., Oron A., Fichman M. Effect of sonic waves on gas filtration by granular beds // J. Aerosol Sci. 2013. V. 57. P. 125–130; DOI: 10.1016/j.jaerosci.2012.10.002
7. Sheng C., Shen X. Simulation of Acoustic Agglomeration Processes of Poly-Disperse Solid Particles // Aerosol Sci. Technol. 2007. V. 41. P. 1–13; DOI: 10.1080/02786820601009704
8. Song L. Modelling of Acoustic Agglomeration of Fine Aerosol Particles: Ph.D Thesis. University Park: Pennsylvania State University, 1990.
9. Khmelev V. N., Golykh R. N., Shalunov A. V., Nesterov V. A. Numerical model of ultrasonic coagulation of dispersed particles in Eckart flows // Interfacial Phenom. Heat Transf. 2022. V. 11, N 2. P. 1–23; DOI: 10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2022045659
10. Shi Y., Bai W., Zhao Z., Ayantobo O., Wang G. Theoretical analysis of acoustic and turbulent agglomeration of droplet aerosols // Adv. Powder Technol. 2023. V. 34, N 10. Article 104145; DOI: 10.1016/j.appt.2023.104145
11. Matsson J. E. An Introduction to Ansys Fluent. Misson: SDC Publications, 2023.
12. Huang G., Leung R., Yang Z. Implementation of Direct Acoustic Simulation using ANSYS Fluent // INTER-NOISE NOISE-CON Congr. Conf. Proc. 2021. P. 1243–1252; DOI: 10.3397/IN-2021-1787
13. Руденко О. В., Солуян С. И. Теоретические основы нелинейной акустики. М.: Наука, 1975.
14. Giese J. H. Stream Functions for Three-Dimensional Flows // J. Math. Phys. 1951. V. 30, N 1–4. P. 31–35; DOI: 10.1002/sapm195130131
15. Buffoni B., Wahlen E. Steady three-dimensional rotational flows: An approach via two stream functions and Nash–Moser iteration // Anal. PDE. 2019. V. 12, N 5. P. 1225–1258; DOI: 10.2140/apde.2019.12.1225

UDC 534.8

A METHOD FOR CALCULATING ULTRASONIC COAGULATION OF PM_{2.5} PARTICLES IN VORTEX AND TURBULENT ACOUSTIC FLOWS

© 2024 V. N. Khmelev^a, A. V. Shalunov^b, R. N. Golykh^c

*Biysk Technological Institute (Branch) of Polzunov Altai State Technical University,
Biysk, Altai krai, 659305 Russia*

E-mails: ^avnh@bti.secna.ru, ^bshalunov@bti.secna.ru, ^cromangl90@gmail.com

Received 03.09.2023, revised 21.11.2023, accepted 07.02.2024

Abstract. We propose a method for calculating the kinetics of ultrasonic coagulation of PM_{2.5} during fine gas cleaning that provides an order of magnitude higher calculation performance. Increased productivity is achieved through the proposed and justified method of reducing the original three-dimensional problem to a two-dimensional one. The proposed reduction method is based on the fact that the time of complete rotation of vortex acoustic flows turns out to be much shorter than the characteristic coagulation time during fine gas cleaning. This makes it possible to present the fractional composition of aerosol particles as a function of two stream functions instead of three coordinates. Calculations carried out using the proposed method make it possible to identify the possibility of increasing the efficiency of coagulation in three-dimensional flows due to the following mechanisms: a local increase in concentration caused by the inertial transfer of particles to the periphery of three-dimensional vortices in the gas phase, increasing the frequency of particle collisions due to three-dimensional turbulent disturbances in ultrasonic fields with a high amplitude of oscillatory velocity (more than 10 m/s), and increasing productivity and ensuring the possibility of continuous implementation of the process in flow mode due to the transfer of particles between the streamlines of the main vortices initiated by ultrasonic vibrations as well as due to external flows perpendicular to the plane of the vortices in three-dimensional space. The developed set of programs for implementing calculations can be used in the design of gas cleaning equipment.

Keywords: ultrasonic, coagulation, vortex, three-dimensional space, turbulence, streamline.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.106

REFERENCES

1. Y. Ma, E. Zang, Y. Liu, Y. Lu, H. Krumholz, M. Bell, and K. Chen, “Wildfire smoke PM_{2.5} and mortality in the contiguous United States,” medRxiv, 2023. <https://doi.org/10.1101/2023.01.31.23285059>
2. I. Ihsan, R. Oktivia, R. Anjani, and N. Xahroh, “Health risk assessment of PM_{2.5} and PM₁₀ in KST BJ Habibie, South Tangerang, Indonesia,” IOP Conf. Ser. Mater. Sci. Eng. **1201**, 012033 (2023). <https://doi.org/10.1088/1755-1315/1201/1/012033>
3. D. Park, T. Kim, and K. Kang, “Black carbon and PM_{2.5} impact analysis in an urban school,” E3S Web Conf. **396**, 01056 (2023). <https://doi.org/10.1051/e3sconf/202339601056>
4. M. A. Torkmahalleh, K. Turganova, Z. Zhigulina, T. Madiyarova, E. K. Adotey, M. Malekipirbazari, G. Buonanno, and L. Stabile, “Formation of cluster mode particles (1–3 nm) in preschools,” Sci. Total Environ. **818**, 151756 (2022). <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2021.151756>
5. E. Riera, I. Gonzalez-Gomez, G. Rodriguez, and J. Gallego-Juarez, “Ultrasonic agglomeration and preconditioning of aerosol particles for environmental and other applications,” in Power Ultrasonics (Cambridge, Woodhead Publ., 2023), 861–886. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-820254-8.00029-4>

6. L. Moldavsky, C. Gutfinger, A. Oron, and M. Fichman, “Effect of sonic waves on gas filtration by granular beds,” *J. Aerosol Sci.* **57**, 125–130 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.jaerosci.2012.10.002>
7. C. Sheng and X. Shen, “Simulation of acoustic agglomeration processes of poly-disperse solid particles,” *Aerosol Sci. Technol.* **41**, 1–13 (2007). <https://doi.org/10.1080/02786820601009704>
8. L. Song, “Modelling of Acoustic Agglomeration of Fine Aerosol Particles,” PhD Thesis (Pennsylvania State Univ., University Park, 1990).
9. V. N. Khmelev, R. N. Golykh, A. V. Shalunov, and V. A. Nesterov, “Numerical model of ultrasonic coagulation of dispersed particles in Eckart flows,” *Interfacial Phenom. Heat Transfer* **11** (2), 1–23 (2022). <https://doi.org/10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2022045659>
10. Y. Shi, W. Bai, Z. Zhao, O. Ayantobo, and G. Wang, “Theoretical analysis of acoustic and turbulent agglomeration of droplet aerosols,” *Adv. Powder Technol.* **34** (10), 104145 (2023). <https://doi.org/10.1016/j.appt.2023.104145>
11. J. E. Matsson, *An Introduction to Ansys Fluent* (SDC Publ., Misson, 2023).
12. G. Huang, R. Leung, and Z. Yang, “Implementation of direct acoustic simulation using ANSYS Fluent,” *INTER-NOISE NOISE-CON Congr. Conf. Proc.* (2021), 1243–1252. <https://doi.org/10.3397/IN-2021-1787>
13. O. V. Rudenko and S. I. Soluyan, *Theoretical Foundations of Nonlinear Acoustics* (Nauka, Moscow, 1975) [in Russian].
14. J. H. Giese, “Stream functions for three-dimensional flows,” *J. Math. Phys.* **30** (1–4), 31–35 (1951). <https://doi.org/10.1002/sapm195130131>
15. B. Buffoni and E. Wahlen, “Steady three-dimensional rotational flows: An approach via two stream functions and Nash–Moser iteration,” *Anal. PDE* **12** (5), 1225–1258 (2019). <https://doi.org/10.2140/apde.2019.12.1225>

УДК 517.928.4:517.929.5

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ С МАЛЫМ ПАРАМЕТРОМ
И МНОГОПИКОВЫЕ АВТОКОЛЕБАНИЯ© 2024 Г. А. Чумаков^{1,3a}, Н. А. Чумакова^{2,3b}¹Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН,
просп. Акад. Коптюга, 4, г. Новосибирск 630090, Россия,²Институт катализа им. Г. К. Борескова СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 5, г. Новосибирск 630090, Россия,³Новосибирский государственный университет,
ул. Пирогова, 2, г. Новосибирск 630090, РоссияE-mails: ^achumakov@math.nsc.ru, ^bchum@catalysis.ruПоступила в редакцию 25.09.2023 г.; после доработки 21.01.2024 г.;
принята к публикации 07.02.2024 г.

Работа посвящена изучению нелинейной динамической системы, состоящей из автономных обыкновенных дифференциальных уравнений с двумя быстрыми переменными x и y , и одной медленной z . Уравнение для переменной z содержит малый параметр μ , причём при $\mu = 0$ система *быстрых движений* входит в однопараметрическое семейство двумерных подсистем с параметром z . Предполагается, что у каждой подсистемы существует грубое периодическое решение L_z . Кроме того, в полной системе существует грубое периодическое решение L , которое при стремлении μ к нулю стремится к периодическому решению l_{z_0} при некотором $z = z_0$. В данной работе на трансверсальной площадке к L в плоскости (y, z) построено двумерное точечное отображение Пуанкаре, для которого доказана теорема существования инвариантного многообразия для стационарной точки, соответствующей периодическому решению L . Это периодическое решение имеет инвариантное многообразие на гарантированном интервале по переменной y и этот интервал отделён от нуля при стремлении μ к нулю. Доказанная теорема позволяет сформулировать достаточные условия существования и отсутствия многопиковых автоколебаний в рассмотренной динамической системе. В качестве примера приложения полученных результатов в работе рассмотрена кинетическая модель каталитической реакции окисления водорода на никеле.

Ключевые слова: обыкновенные дифференциальные уравнения, малый параметр, предельный цикл, инвариантное многообразие, отображение Пуанкаре, кинетическая модель, многопиковые автоколебания.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.107

ВВЕДЕНИЕ

Критические явления — такие как гистерезис стационарных состояний, кинетические и термокинетические автоколебания скорости химических превращений, регулярные и хаотические автоколебания — наблюдаются в различных гомогенных и гетерогенных каталитических системах (например, см. [1–7]). Интенсивные исследования нелинейных эффектов в динамике гетерогенных каталитических реакций проводились в последней трети XX века. В кинетических экспериментах наблюдались сложные автоколебания скорости в гетерогенных каталитических реакциях окисления водорода на металлах платиновой группы или оксида углерода на металлических или цеолитных катализаторах [8–10]. Позднее обнаружены автоколебания скорости реакции окисления углеводородов на никеле и исследованы возможные механизмы изменения структуры и активности катализатора в условиях реакции [11–13].

Развитие качественных методов исследования динамических систем [14–20], асимптотических методов [21, 22] и методов вычислительной математики [23–25] расширило возможности изучения сложных процессов с сосредоточенными и распределёнными параметрами.

В работах [26, 27] показано, что сложные автоколебания и хаос могут определяться кинетическими моделями малой размерности, которые учитывают основные черты процесса — нелинейные стадии реакции и влияние реакционной среды на активность катализатора. Был предложен *принцип генерирования сложной динамики* для динамических систем с одной медленной и двумя быстрыми переменными. В данной работе проводится обоснование принципа генерирования многопиковых автоколебаний.

Рассмотренные в [28–32] кинетические модели автоколебаний скорости гетерогенных каталитических реакций и, в частности, модель Слинько—Чумакова [2, 26, 27, 33] основываются на автономных системах обыкновенных дифференциальных уравнений разной размерности. При качественном исследовании принципиально важным является сведение математических моделей к динамическим системам в фазовом пространстве с двумя быстрыми и одной медленной переменными:

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x, y, z), \\ \dot{y} = g(x, y, z), \\ \dot{z} = \mu h(x, y, z), \end{cases} \quad (1)$$

где функции $f(x, y, z)$, $g(x, y, z)$, $h(x, y, z) \in C^2(R^3)$, а μ — положительный малый параметр.

Следуя принципу генерирования сложной динамики, рассмотрим при $\mu = 0$ *вырожденную* систему (или систему *быстрых движений*), которая представляет собой однопараметрическое семейство двумерных динамических подсистем *полной* системы (1) с параметром z :

$$\begin{cases} \dot{x} = f(x, y, z), \\ \dot{y} = g(x, y, z), \end{cases} \quad z = \text{const}, \quad (2)$$

и предположим, что известна глобальная динамика системы (2) при каждом фиксированном z .

Допустим, что при z из некоторого интервала (z^-, z^+) существует однопараметрическое семейство грубых периодических решений системы (2), а именно: при каждом значении параметра z в двумерном фазовом пространстве системы быстрых движений существует грубое периодическое решение $l_z = l_z(t)$ с периодом $p(z)$ такое, что для любого t

$$l_z(t) = l_z(t + p(z)).$$

Требуется найти периодическое решение $L = L(t)$ полной системы (1), которое при $\mu \rightarrow 0$ сходится к одному из периодических решений $l_z(t)$ для некоторого $z = z_0$, т. е. имеет место топологический предел

$$L \xrightarrow{\mu \rightarrow 0} l_{z_0}.$$

Введём функцию ν переменной z

$$\nu(z) = \int_0^{p(z)} h(l_z(t), z) dt.$$

Верна следующая теорема Понтрягина—Родыгина [34].

Теорема 1. Пусть при каждом z периодическое решение $l_z(t)$ системы быстрых движений (2) является грубым, и пусть при $z = z_0$ выполняются условия

$$\nu(z_0) = 0, \quad \nu'_z(z_0) \neq 0. \quad (3)$$

Тогда существуют $\mu_0 > 0$ и $\rho > 0$ такие, что при любом $\mu \leq \mu_0$ полная система (1) имеет только одно периодическое решение $L(t)$, которое

- 1) целиком лежит в ρ -окрестности замкнутой кривой $(l_{z_0}(t), z_0)$;
- 2) является грубым предельным циклом;
- 3) все траектории полной системы, находящиеся в ρ -окрестности траектории L , либо выходят из этой окрестности, либо стремятся к L .

Цель данной работы: оценить в фазовом пространстве размеры инвариантного многообразия вида $z = \varphi(x, y, \mu)$ грубого периодического решения L полной системы при стремлении параметра μ к нулю.

Для решения этой задачи сначала рассмотрим трансверсальную площадку π к циклу L и с помощью решений полной системы построим отображение Пуанкаре на π . Далее исследуем размеры инвариантного относительно этого отображения многообразия грубой стационарной точки, соответствующей периодическому решению L .

1. ОТОБРАЖЕНИЕ ПУАНКАРЕ

Перепишем полную систему в векторном виде

$$\dot{\xi} = F(\xi), \quad (4)$$

где $\xi = (x, y, z)$, $F(\xi) = (f(x, y, z), g(x, y, z), \mu h(x, y, z)) \in C^2(R^3)$.

Пусть $\eta(t, \xi^0)$ — решение системы (4) с начальными данными $\xi^0 = (\xi_1^0, \xi_2^0, \xi_3^0)$ при $t = 0$.

Лемма 1 [15]. Предположим, что функция $\gamma(t) = \eta(t, 0)$ является периодической с минимальным периодом $p > 0$, причём $\gamma(0) = 0$. Обозначим через π гиперплоскость

$$\pi = \{\xi \in R^3 : (\xi, F(0)) = 0\},$$

ортогональную кривой $l = \{\xi \in R^3 : \xi = \gamma(t), 0 \leq t \leq p\}$ в точке $\xi = 0$. Тогда в окрестности точки $\xi = 0$ существует единственная функция $t = \tau(\xi^0)$ из класса C^1 при малых $\|\xi^0\|$ такая, что $\eta(t, \xi^0) \in \pi$ при $t = \tau(\xi^0)$ и $\tau(0) = p$, т. е.

$$(\eta(\tau(\xi^0), \xi^0), F(0)) = 0. \quad (5)$$

Отображение Пуанкаре. Из леммы 1 следует, что при $\xi^0 \in \pi$ и малых $\|\xi^0\|$ можно задать отображение Пуанкаре

$$T: \xi^1 = \eta(\tau(\xi^0), \xi^0), \quad (6)$$

которое переводит одну окрестность точки $\xi^0 = 0$ в гиперплоскости π на другую.

Для того, чтобы вычислить собственные значения матрицы Якоби отображения (6) в точке $\xi^0 = 0$, рассмотрим временно произвольное ξ^0 (т. е. не будем требовать, чтобы $\xi^0 \in \pi$).

Матрица $H(t, \xi^0) = \partial_{\xi^0} \eta(t, \xi^0)$ удовлетворяет следующей задаче Коши:

$$\frac{d}{dt} H(t, \xi^0) = \partial_{\xi^0} F(\eta(t, \xi^0)) \cdot H(t, \xi^0), \quad H(0, \xi^0) = I,$$

где $\partial_{\xi^0} F(\eta(t, \xi^0))$ — матрица Якоби функции $F(\eta(t, \xi^0))$. В частности, при $\xi^0 = 0$ имеем

$$\frac{d}{dt} H(t, 0) = \partial_{\xi^0} F(\gamma(t)) \cdot H(t, 0), \quad H(0, 0) = I. \quad (7)$$

Заметим, что $H(t, 0)$ — фундаментальная матрица решений системы (7) и матрица коэффициентов $\partial_{\xi^0} F(\gamma(t))$ — периодическая с периодом p . Тогда, согласно теории Флоке, существуют периодическая матричная функция $K(t) \equiv K(t + p)$ и постоянная матрица D такие, что

$$H(t, 0) = K(t) e^{Dt}.$$

Поскольку $\tau(0) = p$ и $K(p) = K(0) = I$, то

$$H(\tau(0), 0) = H(p, 0) = e^{Dp}.$$

Собственные значения e_1, e_2, e_3 матрицы $H(p, 0) = e^{Dp}$ называются *мультипликаторами* периодического решения $\xi = \gamma(t)$. Отметим, что $e_k \neq 0$, так как $H(p, 0)$ — невырожденная матрица. Пусть $e_1 = 1$. Величины $\alpha_k = p^{-1} \ln e_k, k = 1, 2, 3$, называются *характеристическими показателями* периодического решения $\xi = \gamma(t)$.

Поскольку $\gamma(0) = 0$, то после линейной замены переменных ξ можно привести отображение (6) к виду

$$T: \xi^1 = A\xi^0 + \Theta(\xi^0), \quad \xi^0 \in \pi,$$

где A является (3×3) -матрицей, $\Theta(\xi^0) \in C^1$ при малых $\|\xi^0\|$ и

$$\Theta(0) = \partial_{\xi^0} \Theta(0) = 0.$$

Собственные значения матрицы A являются мультипликаторами периодической траектории $\gamma(t)$. Следовательно,

$$a \equiv \|A\| < e^\alpha,$$

при условии, что $|\operatorname{Re} \alpha_k| < \alpha$ для $k = 2, 3$. Поэтому, если норма $\|\xi^0\|$ мала, то значение $\xi^1 = T\xi^0$ определено и имеет место оценка

$$\|\xi^1\| < e^\alpha \|\xi^0\|. \quad (8)$$

Лемма 2. Пусть $T: \xi^0 \rightarrow \xi^1$ — отображение Пуанкаре, определённое равенством (6), где $\xi^0, \xi^1 \in \pi$. Пусть e_1, e_2 и e_3 — мультипликаторы периодического решения $\gamma(t)$. Тогда один из них, например e_1 , равен 1, а e_2 и e_3 являются собственными значениями матрицы Якоби отображения T в точке $\xi^0 = 0$. Кроме того, если система координат выбрана так, что

$$F(0) = (1, 0, 0)^\top$$

и π определяется равенством (5), то матрица $H(p, 0) = (h_{jk}), j, k = 1, 2, 3$, будет иметь вид

$$H(p, 0) = \begin{pmatrix} 1 & -\partial\tau/\partial\xi_2^0 & -\partial\tau/\partial\xi_3^0 \\ 0 & h_{22} & h_{23} \\ 0 & h_{32} & h_{33} \end{pmatrix},$$

т. е. первый столбец $H(p, 0)$ равен $(1, 0, 0)^\top$, первая строка равна $(1, -\partial\tau/\partial\xi_2^0, -\partial\tau/\partial\xi_3^0)$ при $\xi^0 = 0$, а матрица, полученная при вычёркивании первой строки и первого столбца, состоит из элементов матрицы Якоби отображения T в точке $\xi^0 = 0$.

Доказательство. Сначала проверим, что имеет место равенство

$$H(p, 0) F(0) = F(0), \quad (9)$$

т. е. $e_1 = 1$ есть собственное значение матрицы $H(p, 0)$, а $F(0)$ является соответствующим собственным вектором. По предположению $\gamma'(t) = F(\gamma(t))$. Продифференцировав это тождество по t , получим, что вектор $\xi = \gamma'(t)$ удовлетворяет следующей линейной задаче Коши:

$$\xi' = \partial_\xi F(\gamma(t)) \cdot \xi, \quad (10)$$

$$\xi(0) = \gamma'(0) = F(0). \quad (11)$$

Поскольку $H(t, 0)$ — фундаментальная матрица решений линейной системы (10), равная I при $t = 0$ (см. (7)), то решение задачи Коши (10)–(11) представляется в виде

$$\gamma'(t) = H(t, 0)F(0).$$

Отсюда при $t = p$ получим (9), поскольку $\gamma'(p) = \gamma'(0) = F(0)$.

Из (9) следует, что первый столбец $H(p, 0)$ равен $(1, 0, 0)^\top$. Действительно,

$$\begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & h_{13} \\ h_{21} & h_{22} & h_{23} \\ h_{31} & h_{32} & h_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_{11} \\ h_{21} \\ h_{31} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Осталось доказать, что первая строка матрицы $H(p, 0)$ равна $(1, -\partial\tau/\partial\xi_2^0, -\partial\tau/\partial\xi_3^0)$.

Воспользуемся тем, что для любых начальных данных $\xi^0 \in \pi$ решение линейной системы (10) имеет вид

$$\xi(t) = H(t, 0) \xi^0.$$

Полагая $t = p$, мы получим линейное отображение $\xi(p) = H(p, 0) \xi^0$.

При отображении $\xi(p)$ площадка π перейдёт в некоторую площадку π' . Определим величины $\Delta\tau$ и $\Delta\eta$ следующим образом:

$$\Delta\tau = p - \tau(\xi^0), \quad \Delta\eta = \eta(p, \xi^0) - \xi^1.$$

Тогда имеем

$$\Delta\eta = \eta(p, \xi^0) - \eta(\tau(\xi^0), \xi^0) = \eta'_t(\tau(\xi^0), \xi^0) \Delta\tau + \beta_1 \|\xi^0\|, \quad (12)$$

где вектор-функция $\beta_1 = \beta_1(\xi^0)$ стремится к нулю при $\xi^0 \rightarrow 0$.

В силу линеаризации системы (4) в окрестности $\gamma(t)$ (причём $\gamma(0) = 0$), при $0 \leq t \leq p$ имеет место равенство

$$\eta(t, \xi^0) = \gamma(t) + H(t, 0) \xi^0 + \beta_2 \|\xi^0\|,$$

где вектор-функция $\beta_2 = \beta_2(\xi^0)$ стремится к нулю при $\xi^0 \rightarrow 0$.

При $t = p$ выполнено условие $\gamma(p) = \gamma(0) = 0$ и, следовательно,

$$\eta(p, \xi^0) = H(p, 0) \xi^0 + \beta_2 \|\xi^0\|.$$

Подставляя это выражение в (12), получим

$$H(p, 0) \xi^0 - \xi^1 = \Delta\tau \cdot F(\xi^1) + \beta_3 \|\xi^0\|, \quad \beta_3 = \beta_1 - \beta_2.$$

Рассматривая первое уравнение этой системы с учётом того, что $\xi_1^0 = \xi_1^1 = 0$, мы получим

$$h_{12}\xi_2^0 + h_{13}\xi_3^0 = \Delta\tau \cdot F_1(\xi^1) + \beta_3^1 \|\xi^0\|.$$

Тогда

$$\Delta\tau = \frac{h_{12}\xi_2^0 + h_{13}\xi_3^0 - \beta_3^1 \|\xi^0\|}{F_1(\xi^1)}.$$

Поскольку

$$F_1(\xi^1) = 1 + c_1 \xi_1^1 + c_2 \xi_2^1 + c_3 \xi_3^1, \quad 1/F_1(\xi^1) = 1 - \beta_5 + \beta_6 \|\xi^1\|,$$

$$c_j = \frac{1}{2} \partial_{\xi_j^1} F_1(\theta \xi_j^1), \quad \beta_5 = c_1 \xi_1^1 + c_2 \xi_2^1 + c_3 \xi_3^1,$$

мы получаем

$$\Delta\tau = h_{12}\xi_2^0 + h_{13}\xi_3^0 - \beta_3^1 \|\xi^0\| - \beta_5 (h_{12}\xi_2^0 + h_{13}\xi_3^0) + \beta_6 (h_{12}\xi_2^0 + h_{13}\xi_3^0) \|\xi^1\|, \quad (13)$$

где скалярные функции β_5 и β_6 стремятся к нулю при $\xi^0 \rightarrow 0$.

Если разложить $\tau(\xi^0)$ в ряд Тейлора в окрестности точки $\xi = 0$, то, рассматривая временно произвольное ξ^0 и удерживая члены до первого порядка малости, получим

$$\tau(\xi^0) = p - 1 \cdot \xi_1^0 + \frac{\partial \tau}{\partial \xi_2} \cdot \xi_2^0 + \frac{\partial \tau}{\partial \xi_3} \cdot \xi_3^0 + \beta_7 \|\xi^0\|.$$

Тогда

$$\Delta \tau = p - \tau(\xi^0) = -\frac{\partial \tau}{\partial \xi_2} \xi_2^0 - \frac{\partial \tau}{\partial \xi_3} \xi_3^0 - \beta_7 \|\xi^0\|. \quad (14)$$

Приравниваем (13) и (14):

$$h_{12}\xi_2^0 + h_{13}\xi_3^0 + \frac{\partial \tau}{\partial \xi_2} \xi_2^0 + \frac{\partial \tau}{\partial \xi_3} \xi_3^0 = \beta_3^1 \|\xi^0\| + \beta_5 (h_{12}\xi_2^0 + h_{13}\xi_3^0) - \beta_6 (h_{12}\xi_2^0 - h_{13}\xi_3^0) \|\xi^1\| - \beta_7 \|\xi^0\|.$$

Тогда с учётом (8), имеет место оценка

$$\left\| h_{12}\xi_2^0 + h_{13}\xi_3^0 + \frac{\partial \tau}{\partial \xi_2} \xi_2^0 + \frac{\partial \tau}{\partial \xi_3} \xi_3^0 \right\| \leq \beta \|\xi^0\|, \quad (15)$$

где положительная функция $\beta = \beta_3^1 + \beta_5 + \beta_6 + \beta_7$ стремится к нулю при $\|\xi^0\| \rightarrow 0$. Из (15) следует, что

$$h_{12} = -\frac{\partial \tau}{\partial \xi_2}, \quad h_{13} = -\frac{\partial \tau}{\partial \xi_3}.$$

Матрица Якоби отображения (6), если не налагать условие $\xi^0 \in \pi$, равна

$$\partial_{\xi^0} [\eta(\tau(\xi^0), \xi^0)] = \eta'(\tau, \xi^0) \partial_{\xi^0} \tau + H(\tau, \xi^0).$$

При $\xi^0 = 0$ отсюда следует

$$\partial_{\xi^0} [\eta(\tau(\xi^0), \xi^0)]_{\xi^0=0} = F(0) \partial_{\xi^0} \tau(0) + H(p, \xi^0).$$

Первый член справа — это матрица

$$(F_i(0)) \partial \tau(0) / \partial \xi_j^0 = \begin{pmatrix} -1 & \partial \tau / \partial \xi_2^0 & \partial \tau / \partial \xi_3^0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Следовательно,

$$\partial_{\xi^0} [\eta(\tau(\xi^0), \xi^0)]_{\xi^0=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & h_{22} & h_{23} \\ 0 & h_{32} & h_{33} \end{pmatrix}.$$

Таким образом лемма 2 полностью доказана. $\square$

2. ВИД ОТОБРАЖЕНИЯ ПУАНКАРЕ

Предположим, что у грубого седлового периодического решения $\gamma(t)$ полной системы при $\mu \neq 0$ имеется одно устойчивое инвариантное многообразие, т. е. один мультипликатор лежит внутри единичного круга, скажем,

$$e_2 = e_2(\mu), \quad |e_2| < 1,$$

а второе инвариантное многообразие является неустойчивым, т. е. ещё один мультипликатор

$$e_3 = 1 + \varepsilon,$$

$$\varepsilon = \varepsilon(\mu) > 0, \quad \varepsilon \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad \mu \rightarrow 0,$$

и $e_1 = 1$. Заметим, что система быстрых движений имеет однопараметрическое семейство периодических решений. Следовательно, для полной системы при $\mu = 0$ на площадке Пуанкаре π мы получим однопараметрическое семейство стационарных точек. Отсюда следует, что при $\mu = 0$ у периодических решений полной системы (4) существует ещё один мультипликатор, равный 1.

В силу леммы 2 мы можем рассмотреть в окрестности начала координат двумерное точечное отображение Пуанкаре

$$T: (y_0, z_0) \rightarrow (y_1, z_1).$$

Тогда для матрицы A — линейной части двумерного точечного отображения — существует невырожденная матрица P такая, что верно следующее представление

$$P^{-1}AP = \begin{pmatrix} e_2 & 0 \\ 0 & e_3 \end{pmatrix}.$$

Следовательно, в подходящей системе координат в окрестности $(y, z) = (0, 0)$ точечное отображение имеет вид

$$y_1 = e_2 y_0 + G^1(y_0, z_0), \quad z_1 = e_3 z_0 + G^2(y_0, z_0),$$

где

$$G(y_0, z_0) = (G^1(y_0, z_0), G^2(y_0, z_0))^T \in C^1, \quad G(0, 0) = 0, \quad \partial G_{yz}(0, 0) = 0. \quad (16)$$

Введём обозначение матрицы Якоби

$$\partial G_{yz} = \begin{pmatrix} G_y^1 & G_z^1 \\ G_y^2 & G_z^2 \end{pmatrix}.$$

Из (16) следует, что существует некоторая окрестность $D = \{(y, z) : \|(y, z)\| \leq s_0^2\}$ такая, что для всех точек D выполнено неравенство

$$\|\partial G_{yz}\| \leq \theta_0.$$

Тогда в D справедлива оценка

$$\|G\| \leq \theta_0 s_0.$$

Основным результатом этого параграфа является следующая теорема.

Теорема 2. Пусть $T_\mu = (y_0, z_0) \rightarrow (y_1, z_1)$ — точечное отображение вида

$$T_\mu : y_1 = e_2(\mu) y_0 + G^1(y_0, z_0, \mu), \quad z_1 = e_3(\mu) z_0 + G^2(y_0, z_0, \mu),$$

где μ — малый положительный параметр,

$$|e_2(\mu)| < 1, \quad e_3(\mu) = 1 + \varepsilon(\mu), \quad \varepsilon(\mu) > 0, \quad \varepsilon(\mu) \rightarrow 0 \quad \text{при} \quad \mu \rightarrow 0,$$

$G^1(y_0, z_0, \mu), G^2(y_0, z_0, \mu) \in C^1$ при малых $\|y_0\|, \|z_0\|$ и для всех μ

$$G^i(0, 0, \mu) = 0, \quad \partial_{y_0} G^i(0, 0, \mu) = \partial_{z_0} G^i(0, 0, \mu) = 0, \quad i = 1, 2.$$

Тогда существуют величины a_0 и μ_0 такие, что для всех $0 < \mu \leq \mu_0$ существует функция $z = g(y, \mu)$, принадлежащая классу C^1 на интервале $|y| \leq a_0$, такая что

$$g(0, \mu) = 0, \quad \partial_y g(0, \mu) = 0,$$

а отображения

$$R_\mu : u = y, \quad v = z - g(y, \mu), \quad R_\mu^{-1} : y = u, \quad z = v + g(u, \mu)$$

приводят T_μ к виду

$$u_1 = e_2(\mu)u_0 + U(u_0, v_0, \mu), \quad v_1 = e_3(\mu)v_0 + V(u_0, v_0, \mu), \quad (17)$$

где U , V и их частные производные по u_0 и v_0 равны нулю при $u_0 = v_0 = 0$ для всех μ ; и при этом

$$V(u_0, 0, \mu) = 0. \quad (18)$$

Условие (18) означает, что множество точек (u_0, v_0) , лежащих в окрестности начала координат на плоскости $v_0 = 0$, инвариантно относительно отображения (17), т. е. многообразие $z = g(y, \mu)$ инвариантно относительно T_μ на интервале $|y| \leq a_0$ для всех $0 < \mu \leq \mu_0$.

3. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ТЕОРЕМЫ 2

Покажем, что при варьировании параметра μ найдётся такое μ_0 , начиная с которого для всех $0 < \mu \leq \mu_0$ будет выполнена теорема.

Сначала предположим, что отображение R_μ нам известно, т. е. известна функция $g(y, \mu)$. Тогда отображения R^{-1} и $RT R^{-1}$ имеют вид

$$\begin{aligned} R_\mu^{-1} : \quad y_0 &= u_0, \quad z_0 = v_0 + g(u_0, \mu), \\ y_1 &= e_2(\mu)u_0 + G^1(u_0, v_0 + g(u_0, \mu), \mu), \quad z_1 = e_3(\mu)[v_0 + g(u_0, \mu)] + G^2(u_0, v_0 + g(u_0, \mu), \mu), \\ R_\mu T_\mu R_\mu^{-1} : \quad u_1 &= e_2(\mu)u_0 + G^1(u_0, v_0 + g(u_0, \mu), \mu), \\ v_1 &= e_3(\mu)v_0 + e_3(\mu)g(u_0, \mu) + G^2(u_0, v_0 + g(u_0, \mu), \mu) - g[e_2(\mu)u_0 + G^1(u_0, v_0 + g(u_0, \mu), \mu), \mu]. \end{aligned}$$

Отсюда в силу (17) имеем

$$V(u, v, \mu) = e_3(\mu)g(u, \mu) + G^2(u, v + g(u, \mu), \mu) - g[e_2(\mu)u + G^1(u, v + g(u, \mu), \mu), \mu].$$

Условие $V(u_0, 0, \mu) = 0$ можно записать в эквивалентной форме

$$g(u, \mu) = \frac{1}{e_3(\mu)} \left\{ g(e_2(\mu)u + G^1(u, g(u, \mu), \mu), \mu) - G^2(u, g(u, \mu), \mu) \right\}. \quad (19)$$

Таким образом, мы должны показать, что функциональное уравнение (19) имеет решение $g(u, \mu)$ из класса C^1 , удовлетворяющее условиям теоремы 2. Следовательно, мы свели трёхмерную краевую задачу к двумерной с помощью отображения Пуанкаре, а далее — к алгебраическому уравнению (19) для нахождения функции $g(u, \mu)$.

Важно не покидать область определения функций $g(u, \mu)$. Так как мы рассматриваем $G(\xi) = (G^1(\xi), G^2(\xi))$ в некоторой окрестности D , допустим, что область определения $g(u, \mu)$ есть $|u| \leq s_0$. Чтобы $g(u, \mu)$ была определена, нужно проверить, что для аргумента выполнено неравенство

$$\|e_2(\mu)u + G^1(u, g(u, \mu), \mu)\| \leq s_0.$$

Для этого рассмотрим оценку $\|G^1(u, g(u, \mu), \mu)\| \leq s_0$, которая имеет место при $\|u\| \leq s_0$ и $\|g(u, \mu)\| \leq s_0$. Тогда

$$\|e_2(\mu)u + G^1(u, g(u, \mu), \mu)\| \leq (|e_2(\mu)| + \theta_0)|u| \leq s_0,$$

дополнительно предположив, что

$$|e_2(\mu)| + \theta_0 < 1. \quad (20)$$

Таким образом, если предположить, что

$$1) \quad \|u\| \leq s_0, \quad 2) \quad |e_2(\mu)| + \theta_0 < 1,$$

то функция $g(u, \mu)$ определена и $\|g(u, \mu)\| \leq s_0$. Последняя оценка будет вытекать из оценки производной функции $g(u, \mu)$, которая будет приведена ниже.

Параметр s_0 может как уменьшать, так и расширять область существования инвариантного многообразия для двумерной системы (соответственно, область существования инвариантной поверхности для системы трёх уравнений), но мы всегда можем рассматривать исходную задачу в меньшей области, если s_0 уменьшило область, или в исходной области, если s_0 увеличила область существования.

3.1. Метод последовательных приближений

Будем решать уравнение (19) методом последовательных приближений. Пусть

$$g_0(u, \mu) \equiv 0$$

и после того, как найдена функция $g_{n-1}(u, \mu)$, положим

$$g_n(u, \mu) = \frac{1}{e_3(\mu)} \left\{ g_{n-1}(e_2(\mu)u + G^1(u, g_{n-1}(u, \mu), \mu), \mu) - G^2(u, g_{n-1}(u, \mu), \mu) \right\}. \quad (21)$$

3.2. Оценка производных. Равномерная ограниченность

Введём для краткости следующие обозначения

$$g_n(u) = g_n(u, \mu), \quad e_i = e_i(\mu), \quad G^i(u, g_{n-1}(u)) = G^i(u, g_{n-1}(u, \mu), \mu).$$

Для удобства записи частной производной мы будем сверху писать индекс координаты, а снизу переменную, по которой дифференцируем. Производная от функции $g_n(u)$ по u имеет вид:

$$e_3 g'_n(u) = g'_{n-1}(e_2 u + G^1(u, g_{n-1}(u))) \cdot [e_2 + G^1_y(u, g_{n-1}(u)) + g'_{n-1}(u) \cdot G^1_z(u, g_{n-1}(u))] - G^2_y(u, g_{n-1}(u)) - g'_{n-1}(u) \cdot G^2_z(u, g_{n-1}(u)). \quad (22)$$

При $n = 1$ получаем $e_3 g'_1(u) = -G^2_y(u, 0)$. Тогда

$$\|g'_1(u)\| \leq \frac{1}{e_3} \theta_0. \quad (23)$$

Если $\theta_0 < e_2$, то для всех рассматриваемых μ функция $g'_1(u)$ ограничена $\|g'_1(u)\| \leq \frac{\theta_0}{e_3} s_0 \leq s_0$. Определим число σ равенством

$$\sigma = \frac{\theta_0}{e_3 - e_2 - 3\theta_0} \quad \text{так, что} \quad 0 < \sigma < 1.$$

Покажем по индукции, что для всех n выполнено неравенство

$$\|g'_n(u)\| \leq \sigma. \quad (24)$$

Очевидно, что (24) выполняется при $n = 0$. Для $n = 1$ из оценки (23) вытекает (24), так как $\theta_0/e_3 < \sigma$. Предположим, что (24) выполнено при $n - 1$. Тогда из (22) и условия $\sigma < 1$ следует

$$e_3 \|g'_n(u)\| \leq \|g'_{n-1}(e_2 u + G^1(u, g_{n-1}(u)))\| \cdot [e_2 + G^1_y(u, g_{n-1}(u)) + g'_{n-1}(u) \cdot G^1_z(u, g_{n-1}(u))] +$$

$$+ \|G_y^2(u, g_{n-1}(u))\| + \|g'_{n-1}(u) \cdot G_z^2(u, g_{n-1}(u))\| \leq \\ \leq \sigma[e_2 + \theta_0 + \theta_0] + \theta_0 + \sigma\theta_0 \leq \sigma(e_2 + 3\theta_0) + \theta_0.$$

Так как $\sigma(e_2 + 3\theta_0) + \theta_0 = e_3\sigma$, отсюда следует искомое неравенство.

Влияние параметра μ . Заметим, что мультипликаторы e_2 и e_3 зависят от параметра μ . Однако, величины σ , θ_0 при $\mu \in [0, \mu_0]$ не должны зависеть от μ . Так как θ_0 выбирается для выполнения оценки на производные функции $G(y, z, \mu)$, то в силу гладкости функции мы можем выбрать одно значение θ_0 для всех $\mu \leq \mu_0$ при достаточно малых μ_0 .

Выбор параметра σ . Выберем σ так, чтобы неравенство (24) выполнялось для всех $\mu \leq \mu_0$. Посмотрим, что происходит с мультипликаторами при варьирования μ :

1) По предположению $0 < e_2 < 1$ для всех μ . Следовательно, существуют

$$e_2^- \equiv \min_{\mu} e_2(\mu), \quad e_2^+ \equiv \max_{\mu} e_2(\mu)$$

такие, что для всех $0 \leq \mu \leq \mu_0$ выполнены неравенства $0 < e_2^- < e_2(\mu) < e_2^+ < 1$.

2) $e_3 = 1 + \varepsilon(\mu)$, где $\varepsilon(\mu) > 0$ и стремится к нулю вместе с μ . Следовательно,

$$e_3^- \equiv \min_{\mu} e_3(\mu) = 1, \quad e_3^+ \equiv \max_{\mu} e_3(\mu).$$

Таким образом, из условия, что $0 < \sigma < 1$ получаем $\theta_0 < e_3 - e_2 - 3\theta_0$ или $\theta_0 < (e_3 - e_2)/4$. Если в правой части неравенства заменить e_3 на 1, а e_2 на e_2^+ , то неравенство лишь усилится, и оценка будет выполнена для всех $0 \leq \mu \leq \mu_0$:

$$\theta_0 < (1 - e_2^+)/4, \quad (25)$$

$$e_2^+ + 4\theta_0 < 1. \quad (26)$$

В рассуждениях об области определения функции $g(u)$ было ещё условие (20) на θ_0 , но оно следует из (25).

3.3. Оценка производных. Равностепенная непрерывность

Теперь проверим, что $g'_0, g'_1, \dots, g'_n, \dots$ *равностепенно непрерывны*.

Для всякой функции $f = f(u)$ или $f = f(y, z)$ положим соответственно

$$\Delta f = f(u + \Delta u) - f(u), \quad \Delta f = f(y + \Delta y, z + \Delta z) - f(y, z).$$

Пусть

$$h_1(\delta) = \sup (\| \Delta G_y^1 \|, \| \Delta G_z^1 \|, \| \Delta G_y^2 \|, \| \Delta G_z^2 \|) \quad \text{при} \quad \| \Delta y \|, \| \Delta z \| \leq \delta.$$

Покажем по индукции, что

$$\| \Delta g'_n \| \leq h^+(\delta) \quad \text{при} \quad \| \Delta u \| \leq \delta < 1. \quad (27)$$

где

$$h(\delta) = \frac{4h_1(\delta)}{e_3 - e_2 - 4\theta_0}. \quad (28)$$

В зависимости от μ величину $h^+(\delta)$ будем брать в виде

$$h^+(\delta) = \frac{4h_1(\delta)}{1 - e_2^+ - 4\theta_0}.$$

Ясно, что при $n = 0$ выполнена оценка (27). Рассмотрим случай $n = 1$. Из (22) получаем

$$g'_1(u) = -\frac{1}{e_2} G_y^2(u, 0)$$

и, следовательно,

$$\|\Delta g'_1(u)\| = \frac{1}{e_3} \left\| -G_y^2(u + \Delta u, 0) + G_y^2(u, 0) \right\| \leq \frac{h_1(\delta)}{e_3} \leq h^+(\delta).$$

Из (24) и $\sigma < 1$ следует оценка $\|\Delta g_1(u)\| \leq \sigma \|\Delta u\| \leq \|\Delta u\|$.

Предположим, что неравенство (27) доказано для $n - 1$. Заметим, что в силу (24) $\|\Delta g_{n-1}(u)\| \leq \sigma \|\Delta u\| \leq \|\Delta u\|$. Отсюда

$$\sup \left(\|\Delta G_y^1(u, g_{n-1}(u))\|, \|\Delta G_z^1(u, g_{n-1}(u))\|, \|\Delta G_y^2(u, g_{n-1}(u))\|, \|\Delta G_z^2(u, g_{n-1}(u))\| \right) \leq h_1(\|\Delta u\|),$$

и применяя теорему о среднем, получим

$$\left\| \Delta [e_2 u + G^1(u, g_{n-1}(u))] \right\| \leq (e_2^+ + 2\theta_0) \cdot \|\Delta\| \leq \|\Delta\|,$$

причём последнее неравенство следует из (26).

Используя тождество $\Delta[f_1(u) \cdot f_2(u)] = (\Delta f_1)f_2(u) + f_1(u + \Delta u)\Delta f_2$ и неравенство $\sigma < 1$, оценим первое слагаемое в (22):

$$\begin{aligned} & \left\| \Delta \left\{ g'_{n-1} [e_2 u + G^1(u, g_{n-1}(u))] \right\} \cdot [e_2 + G_y^1(u, g_{n-1}(u)) + g'_{n-1}(u) \cdot G_z^1(u, g_{n-1}(u))] \right\| + \\ & + \left\| g'_{n-1} (e_1(u + \Delta u) + G^1(u + \Delta u, g_{n-1}(u) + \Delta g_{n-1}(u))) \times \right. \\ & \times \Delta [e_2 + G_y^1(u, g_{n-1}(u)) + g'_{n-1}(u) \cdot G_z^1(u, g_{n-1}(u))] \left. \right\| \leq h^+(\delta)(e_2^+ + \theta_0 + \theta_0\sigma) + \\ & + \sigma \cdot \left\| \Delta G_y^1(u, g_{n-1}(u)) + \Delta g'_{n-1}(u) \cdot G_z^1(u, g_{n-1}(u)) + g'_{n-1}(u + \Delta u) \cdot \Delta G_z^1(u, g_{n-1}(u)) \right\| \\ & \leq h^+(\delta)(e_2^+ + \theta_0 + \theta_0\sigma) + \sigma \cdot (h_1(\delta) + h(\delta)\theta_0 + \sigma h_1(\delta)) \\ & \leq h^+(\delta)(e_2^+ + 3\theta_0) + 2h_1(\delta). \end{aligned}$$

Оценим последние два слагаемые:

$$\begin{aligned} & \left\| \Delta G_y^2(u, g_{n-1}(u)) + \Delta [g'_{n-1}(u) \cdot G_z^2(u, g_{n-1}(u))] \right\| \\ & \leq \left\| \Delta G_y^2(u, g_{n-1}(u)) \right\| + \left\| \Delta g'_{n-1}(u) \cdot G_z^2(u, g_{n-1}(u)) + g'_{n-1}(u + \Delta u) \cdot \Delta G_z^2(u, g_{n-1}(u)) \right\| \\ & \leq h_1(\delta) + h^+(\delta)\theta_0 + h_1(\delta)\sigma \leq 2h_1(\delta) + h^+(\delta)\theta_0. \end{aligned}$$

Таким образом, используя (28), получаем оценку

$$\|\Delta g'_n(u)\| \leq \frac{1}{e_3} [h^+(\delta)(e_1^+ + 4\theta_0) + 4h_1(\delta)] = h^+(\delta),$$

которая для всех $\mu \in [0, \mu_0]$ доказывает равностепенную непрерывность последовательности $\{g'_n\}_0^\infty$. Действительно, для данной оценки существует μ_0 , начиная с которого для всех $\mu \leq \mu_0$ она будет выполнена. Существование такого μ_0 следует из условия (26) при выборе θ_0 .

3.4. Равномерная сходимость функций

Далее можно показать, что последовательность $g_0, g_1, \dots, g_n, \dots$ сходится равномерно на каждом ограниченном u -множестве. Для этого достаточно установить, что существуют такие постоянные M и r , что $0 < r < 1$ и при $n = 1, 2, \dots$

$$\|g_n(u) - g_{n-1}(u)\| \leq M \|u\| r^n. \quad (29)$$

Это неравенство верно при $n = 1$, если M и r таковы, что $Mr = \sigma$. Предположим, что для $n - 1$ неравенство доказано. Тогда воспользуемся представлением

$$e_3 g_n(u) = g_{n-1}(e_2 u + G^1(u, g_{n-1}(u))) - G^2(u, g_{n-1}(u)).$$

Справедлива цепочка неравенств:

$$\begin{aligned} e_3 \|g_n(u) - g_{n-1}(u)\| &\leq \|g_{n-1}(e_2 u + G^1(u, g_{n-1}(u))) - G^2(u, g_{n-1}(u)) - \\ &\quad - g_{n-2}(e_2 u + G^1(u, g_{n-2}(u))) + G^2(u, g_{n-2}(u))\| + \\ &\leq \|g_{n-1}(e_2 u + G^1(u, g_{n-1}(u))) - g_{n-2}(e_2 u + G^1(u, g_{n-2}(u)))\| + \\ &\quad + \|G^2(u, g_{n-1}(u)) - G^2(u, g_{n-2}(u))\|. \end{aligned}$$

Первое слагаемое оценивается сверху:

$$\begin{aligned} &\|g_{n-1}(e_2 u + G^1(u, g_{n-1}(u))) - g_{n-2}(e_2 u + G^1(u, g_{n-2}(u)))\| \\ &\leq \|g_{n-1}(e_2 u + G^1(u, g_{n-1}(u))) - g_{n-2}(e_2 u + G^1(u, g_{n-1}(u)))\| + \\ &\quad + \|g_{n-2}(e_2 u + G^1(u, g_{n-1}(u))) - g_{n-2}(e_2 u + G^1(u, g_{n-2}(u)))\| \leq \\ &\leq M \|e_2 u + G^1(u, g_{n-1}(u))\| r^{n-1} + \sigma \|e_2 u + G^1(u, g_{n-1}(u)) - e_2 u + G^1(u, g_{n-2}(u))\| \\ &\leq M \|e_2 u + G^1(u, g_{n-1}(u))\| r^{n-1} + \sigma \theta_0 \|g_{n-1}(u) - g_{n-2}(u)\| \\ &\leq M \|e_2 u + G^1(u, g_{n-1}(u))\| r^{n-1} + \sigma \theta_0 M \|u\| r^{n-1}. \end{aligned}$$

Для второго слагаемого получаем оценку

$$\|G^2(u, g_{n-1}(u)) - G^2(u, g_{n-2}(u))\| \leq \theta_0 \|g_{n-1}(u) - g_{n-2}(u)\| \leq \theta_0 M \|u\| r^{n-1}.$$

Окончательно имеем:

$$\begin{aligned} e_3 \|g_n(u) - g_{n-1}(u)\| &\leq M \|e_2 u + G^1(u, g_{n-1}(u))\| r^{n-1} + \sigma \theta_0 M \|u\| r^{n-1} + \theta_0 M \|u\| r^{n-1} \\ &\leq M(e_2^+ + 2\theta_0) \|u\| r^{n-1} + M\theta_0 \|u\| r^{n-1} + M\theta_0 \|u\| r^{n-1} = M \|u\| r^{n-1} (e_2^+ + 4\theta_0). \end{aligned}$$

Таким образом, если $r = e_2^+ + 4\theta_0$ и $M = \sigma/r$, то справедливость неравенства (29) доказана. Тогда при $m > n$ получаем:

$$\|g_m(u) - g_n(u)\| \leq (r^{n+1} + r^{n+2} + \dots + r^m) M \|u\| \leq \frac{r^{n+1}}{1-r} M \|u\|,$$

то есть существует номер $N(\varepsilon)$ такой, что для всех $n, m > N$ верно

$$\|g_m(u) - g_n(u)\| \leq \frac{r^N}{1-r} M \|u\| < \varepsilon.$$

Следовательно, последовательность g_n удовлетворяет критерию Коши и сходится равномерно на ограниченном u -множестве. Таким образом, последовательность $\{g_n(u)\}$ сходится к $g(u)$ равномерно на всяком ограниченном множестве. В силу (21) предельная функция $g(u)$ удовлетворяет функциональному уравнению (19). Последовательность $g'_0, g'_1, \dots, g'_n, \dots$ равномерно ограничена и равностепенно непрерывна, следовательно, в ней существует подпоследовательность, сходящаяся равномерно на каждом ограниченном u -множестве. Так как существует равномерно сходящаяся подпоследовательность производных, а сама функция сходится равномерно, отсюда следует, что $g(u) \in C^1$. Теорема 2 доказана.

4. КИНЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

В кинетических экспериментах по изучению гетерогенной каталитической реакции окисления водорода на платиновых и никелевых катализаторах при определённых условиях наблюдается сложная динамика, например, многопиковые автоколебания скорости. В работах [26, 27]

показано, что сложные многопиковые автоколебания могут определяться кинетическими моделями малой размерности, которые учитывают основные черты процесса — нелинейные стадии реакции и влияние реакционной среды на активность катализатора. Рассматриваются *быстрые движения* — обратимая адсорбция водорода и кислорода, а также взаимодействие промежуточных веществ на поверхности катализатора, и *медленные движения* — растворение кислорода или водорода в приповерхностном слое металла. Дальнейшее исследование этих моделей проводится с целью определения условий возникновения высокой параметрической чувствительности, обусловленной внутренними свойствами — механизмом химических превращений.

Одна из нелинейных кинетических моделей автоколебательной гетерогенной каталитической реакции окисления водорода на металлическом катализаторе [28–31] описывается динамической системой

$$\begin{cases} \dot{x} = K_1(1 - x - y)^2 - K_{-1}x^2 - 2k_3(y)x^2y, \\ \dot{y} = K_2(1 - x - y)^2 - K_{-2}y^2 - k_4(y, z)y - k_3(y)x^2y, \\ \dot{z} = \mu y(1 - z) - \alpha z(1 - x - y), \end{cases} \quad (30)$$

определённой в области $\Omega = \{(x, y, z) \in R^3 : 0 \leq x, y, z \leq 1, x + y \leq 1\}$. Здесь $x = [\text{MeH}]$ и $y = [\text{MeO}]$ — концентрации водорода и кислорода, адсорбированных на поверхности катализатора, $z = [\text{Me}_v\text{O}]$ — концентрации кислорода, растворённого в приповерхностном слое катализатора. Функции $k_3(y)$ и $k_4(y, z)$ определяют константы скоростей двух стадий реакции с учётом влияния реакционной среды на катализатор:

$$k_3(y) = K_{30} \exp(-\mu_3 y), \quad k_4(y) = K_{40} \exp(-\mu_4 y + \mu_5 z),$$

$\mu = k_5$, $\alpha = k_{-5}/k_5$, кинетические параметры положительны:

$$K_1, K_2, K_{-1}, K_{-2}, K_{30}, K_{40}, k_5, k_{-5}, \mu_3, \mu_4, \mu_5 > 0.$$

Следуя принципу генерирования сложной динамики, рассмотрим при $\mu = 0$ *вырожденную* систему (или систему *быстрых движений*), которая представляет собой однопараметрическое семейство двумерных динамических подсистем *полной* системы (30) с параметром z :

$$\begin{cases} \dot{x} = K_1(1 - x - y)^2 - K_{-1}x^2 - 2k_3(y)x^2y, \\ \dot{y} = K_2(1 - x - y)^2 - K_{-2}y^2 - k_4(y, z)y - k_3(y)x^2y, \end{cases} \quad z = \text{const}. \quad (31)$$

При изучении динамики полной системы (30) мы рассмотрели

- математический образ сложных автоколебаний;
- многопиковые автоколебания;
- пучки траекторий типа *тоннеля* и трёхмерные решения-утки;
- автоколебания, близкие к двумерным.

Математический образ сложных автоколебаний. В работах [26, 27] для динамических систем с одной медленной и двумя быстрыми переменными типа (30) был сформулирован *принцип генерирования сложных колебаний*, который основывается на анализе глобальной динамики вырожденной системы при $\mu = 0$ с параметром z . Рассмотрим однопараметрическое семейство динамических систем быстрых движений вида (31) и предположим, что при $0 \leq z < a$ и $b < z \leq 1$ имеется единственное глобально асимптотически устойчивое стационарное состояние, а в интервале $a < z < b$ — три стационарных состояния, одно из которых

является седлом, а два других устойчивы. Предположим, что единственная стационарная точка (x_s, y_s, z_s) системы (30) лежит на седловой ветви стационарных состояний (31). Тогда при малых μ полная система будет генерировать релаксационные автоколебания (см. рис. 1(a)).

Многопиковые автоколебания. Пусть, кроме того, при каждом фиксированном $z \in (a, b)$ вырожденная система (31) имеет фазовый портрет, содержащий одновременно грубый устойчивый предельный цикл $\gamma(z)$ и устойчивое стационарное состояние, причём каждый предельный цикл $\gamma(z)$ окружает только одну неустойчивую стационарную точку; топологическим пределом $\gamma(z)$ при $z \rightarrow z^+$ или $z \rightarrow z^-$, где $a < z^- < z^+ < b$, является стационарная точка, которая является сложным фокусом первого порядка. Предположим также, что поверхность $\Gamma = \{h(x, y, z) = 0\}$ не пересекает поверхность S , состоящую из однопараметрического семейства периодических решений $\gamma(z)$. Тогда при малых μ полная система генерирует многопиковые автоколебания (см. рис. 1(b)).

Решения-утки. Как доказано в [32], в случае рис. 1(b) внутри поверхности S вблизи стационарной ветви $AKLB$ существует пучок траекторий типа *тоннеля*, который состоит из трёхмерных *решений-уток*. Этот феномен порождает высокую параметрическую чувствительность решений к начальным данным в окрестности медленной кривой KL .

Автоколебания, близкие к двумерным. Рассмотрим случай, когда поверхность Γ пересекает поверхность S и кривую BC , как показано на рис. 1(c). Пусть, кроме того, существует $z = z_0$ такое, что выполнены условия (3) теоремы 1, а именно, $\nu(z_0) = 0$, $\nu'_z(z_0) < 0$. Тогда существует $\mu_0 > 0$ такое, что при $\mu \leq \mu_0$ полная система имеет устойчивый предельный цикл L (близкий к двумерному), у которого имеется инвариантное многообразие вида $z = \varphi(x, y, \mu)$. Размер области определения многообразия φ по (x, y) не зависит от μ при $\mu \leq \mu_0$. Отсюда следует, что L будет притягивать траектории, расположенные вблизи поверхности S , и поэтому в полной системе невозможно существование многопиковых автоколебаний (см. рис. 1(c)).

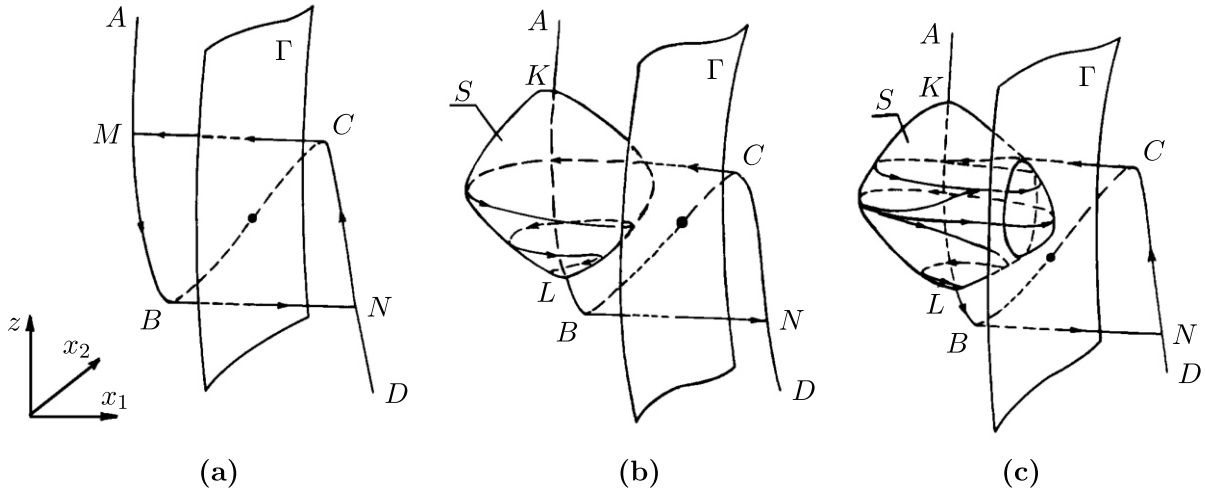
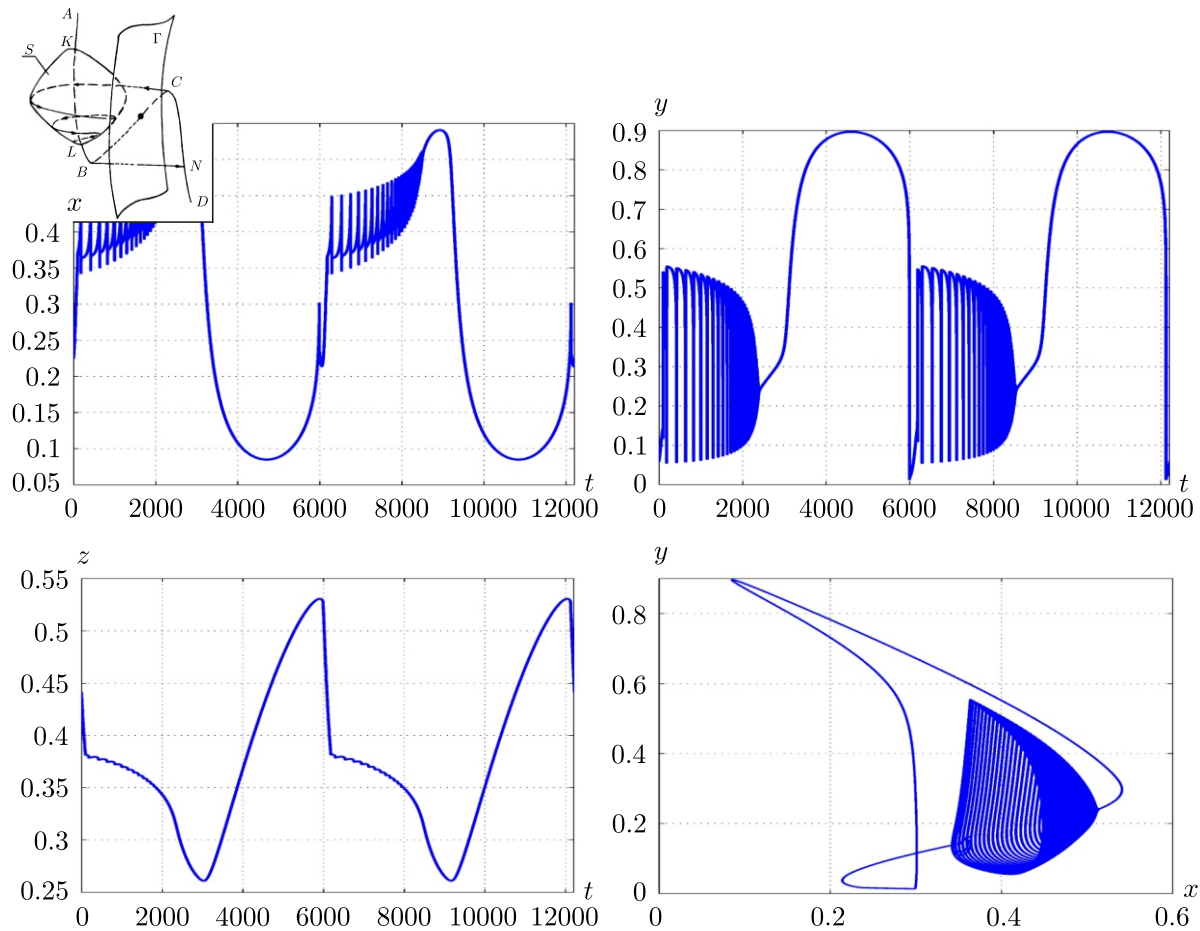


Рис. 1. Сценарий возникновения многопиковых автоколебаний (b) из предельного цикла (a) и критерий их отсутствия (c)

Численный эксперимент. Рассмотрим динамику системы (30) при следующих значениях параметров: $K_1 = 0.2$, $K_{-1} = 0.01$, $K_2 = 9.451$, $K_{-2} = 0$, $K_{30} = 100$, $K_{40} = 2$, $\mu_3 = 30$, $\mu_4 = 12$, $\mu_5 = 10$ и $\mu = 0.00025$.

Если в качестве варьируемого параметра мы выберем α , то при $\alpha = 14$ и фиксированных остальных параметрах достаточные условия (3) теоремы 1 не выполняются. Поэтому полная система в этом случае генерирует многопиковые автоколебания вида (b) (см. рис. 2).

При $\alpha = 10$ существует z_0 такое, что достаточные условия (3) выполняются. Следовательно, в полной системы существует предельный цикл L , который близок к двумерному предель-

Рис. 2. Многопиковые автоколебания вида (b) при $\alpha = 14$

ному циклу $\gamma(z_0)$ вырожденной системы (см. рис. 3). Кроме того, по теореме 2 у предельного цикла L существует инвариантное многообразие вида $z = \varphi(x, y, \mu)$ вблизи поверхности S , область определения которого по переменным (x, y) не уменьшается при стремлении малого параметра к нулю, что не позволяет системе генерировать многопиковые автоколебания при достаточно малых μ .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе проводится обоснование *принципа генерирования многопиковых автоколебаний* для динамических систем с одной медленной и двумя быстрыми переменными.

Сначала доказана лемма 2 об отображении Пуанкаре и виде фундаментальной матрицы $H(p, 0)$ линеаризованной системы в окрестности периодического решения полной системы. Теорема 2 утверждает существование инвариантного многообразия вида $z = \varphi(x, y, \mu)$ у предельного цикла L полной системы, область определения которого в фазовом пространстве не уменьшается при стремлении $\mu \rightarrow 0$. Теорема 2 позволяет сформулировать достаточные условия существования и отсутствия многопиковых автоколебаний.

Для кинетической модели окисления водорода на никеле найдены параметры, при которых система генерирует многопиковые автоколебания, а при изменении одного из параметров многопиковые автоколебания исчезают и появляется предельный цикл L , близкий к предельному циклу $\gamma(z_0)$ вырожденной системы.

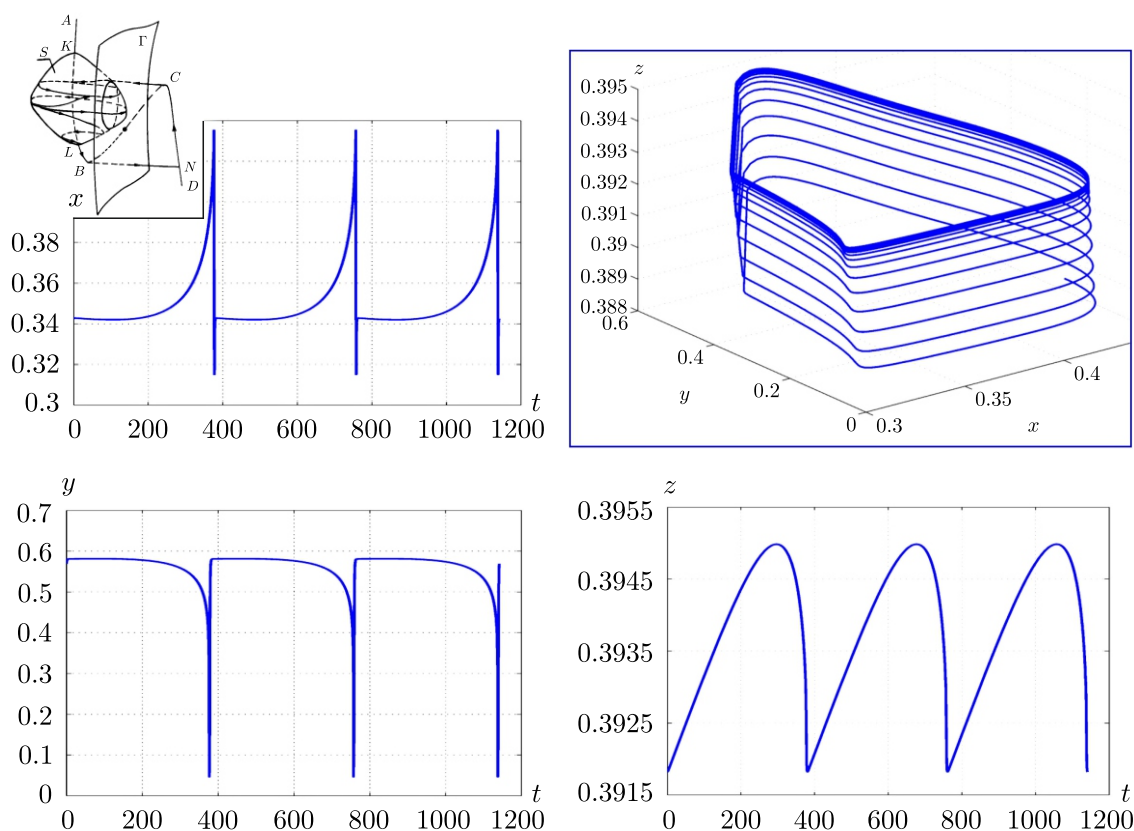


Рис. 3. Релаксационные автоколебания вида (с) при $\alpha = 10$

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственных заданий Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН (проект FWNF-2022-0005) и Института катализа им. Г. К. Борескова СО РАН (проект FWUR-2024-0037). Других источников финансирования проведения или руководства данным конкретным исследованием не было.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Жаботинский А. М. Концентрационные автоколебания. М.: Наука, 1974.
2. Гарел Д., Гарел О. Колебательные химические реакции. М.: Мир, 1986.
3. Ertl G. Oscillatory Catalytic Reactions at Single-Crystal Surfaces // *Adv. Catal.* 1990. V. 37. P. 213–277.
4. Schüth F., Henry B. E., Schmidt L. D. Oscillatory Reactions in Heterogeneous Catalysis // *Adv. Catal.* 1993. V. 39. P. 51–127.
5. Imbihl R. Oscillatory Reactions on Single-Crystal Surfaces // *Prog. Surf. Sci.* 1993. V. 44. P. 185–343.
6. Imbihl R., Ertl G. Oscillatory Kinetics in Heterogeneous Catalysis // *Chem. Rev.* 1995. V. 95, N 3. P. 697–733; DOI: 10.1021/cr00035a012
7. Slinko M. M., Jaeger N. I. *Oscillating Heterogeneous Catalytic Systems*. Amsterdam: Elsevier, 1994.
8. Беляев В. Д., Слинко М. М., Слинко М. Г., Тимошенко В. И. Автоколебания в гетерогенной каталитической реакции водорода с кислородом // *Доклады АН СССР*. 1974. Т. 214, № 5. С. 1098–1100.

9. Слинько М. Г. Динамика химических процессов и реакторов // Химич. пром. 1979. № 11. С. 260–268.
10. Куркина Е. С., Песков Н. В., Слинько М. М., Слинько М. Г. О природе хаотических колебаний скорости реакции окисления СО на Pd-цеолитном катализаторе // Доклады РАН. 1996. Т. 351, № 4. С. 497–501.
11. Lashina E. A., Kaichev V. V., Chumakova N. A., Ustyugov V. V., Chumakov G. A., Bukhtiyarov V. I. Mathematical Simulation of Self-Oscillations in Methane Oxidation on Nickel: An Isothermal Model // Kinet. Catal. 2012. V. 53. P. 374–383; DOI: 10.1134/S0023158412030081
12. Lashina E. A., Kaichev V. V., Saraev A. A., Vinokurov Z. S., Chumakova N. A., Chumakov G. A., Bukhtiyarov V. I. Experimental Study and Mathematical Modeling of Self-Sustained Kinetic Oscillations in Catalytic Oxidation of Methane over Nickel // J. Phys. Chem. A. 2017. V. 121. P. 6874–6886; DOI: 10.1021/acs.jpca.7b04525
13. Lashina E. A., Kaichev V. V., Saraev A. A., Chumakova N. A., Chumakov G. A., Bukhtiyarov V. I. Self-Sustained Oscillations in Oxidation of Propane over Nickel: Experimental Study and Mathematical Modelling // Top. Catal. 2020, V. 63, N 1–2. P. 33–48; DOI: 10.1007/s11244-019-01219-5
14. Андронов А. А., Леонтович Е. А., Гордон И. И., Майер А. Г. Качественная теория динамических систем второго порядка. М.: Наука, 1966.
15. Хартман Ф. Обыкновенные дифференциальные уравнения. М.: Мир, 1970.
16. Постон Т., Стюарт И. Теория катастроф и её приложения. М.: Мир. 1980.
17. Robinson C. Dynamical Systems: Stability, Symbolic Dynamics, and Chaos. Boca Raton: CRC Press, 1995.
18. Шильников Л. П., Шильников А. Л., Тураев Д. В., Чуа Л. Методы качественной теории в нелинейной динамике. Часть 1. Москва—Ижевск: ИКИ, 2004.
19. Шильников Л. П., Шильников А. Л., Тураев Д. В., Чуа Л. Методы качественной теории в нелинейной динамике. Часть 2. Москва—Ижевск: ИКИ, 2009.
20. Abbondandolo A., Asselle L., Benedetti G., Mazzucchelli M., Taimanov I. A. The Multiplicity Problem for Periodic Orbits of Magnetic Flows on the 2-Sphere // Adv. Nonlinear Stud. 2017. V. 17, N 1. P. 17–30; DIO: 10.1515/ans-2016-6003
21. Звонкин А. К., Шубин М. А. Нестандартный анализ и сингулярные возмущения обыкновенных дифференциальных уравнений // Успехи мат. наук. 1984. Т. 39, № 2. С. 77–127.
22. Васильева А. Б., Бутузов В. Ф. Асимптотические методы в теории сингулярных возмущений. М.: Высшая школа, 1990.
23. Solari H. G., Natiello M. A., Mindlin G. B. Nonlinear Dynamics: A Two-way Trip from Physics to Math. London—Bristol—Philadelphia: Institute of Physics, 1996.
24. Kuznetsov Yu. A. Elements of Applied Bifurcation Theory. N. Y.: Springer, 1998.
25. Гукенхаймер Дж., Холмс Ф. Нелинейные колебания, динамические системы и бифуркации векторных полей. Москва—Ижевск: ИКИ, 2002.
26. Чумаков Г. А., Слинько М. Г., Беляев В. Д. Сложные изменения скорости гетерогенных каталитических реакций // Доклады АН СССР. 1980. Т. 253, № 3. С. 653–658.
27. Чумаков Г. А., Слинько М. Г. Кинетическая турбулентность (хаос) скорости реакции взаимодействия водорода с кислородом на металлических катализаторах // Доклады АН СССР. 1982. Т. 266, № 5. С. 1194–1198.
28. Chumakov G. A., Chumakova N. A. Relaxation Oscillations in a Kinetic Model of Catalytic Hydrogen Oxidation Involving a Chase on Canards // Chem. Eng. J. 2003. V. 91. P. 151–158; DOI: 10.1016/S1385-8947(02)00148-1
29. Чумаков Г. А. Математические вопросы моделирования автоколебаний скорости гетерогенной каталитической реакции. I // Сиб. матем. журн. 2005. Т. 46, № 5. С. 1179–1189.
30. Чумаков Г. А. Динамика нелинейной системы дифференциальных уравнений // Сиб. матем. журн. 2007. Т. 48, № 5. С. 1180–1195.

31. *Chumakov G. A., Chumakova N. A., Lashina E. A. Modeling the Complex Dynamics of Heterogeneous Catalytic Reactions with Fast, Intermediate, and Slow Variables // Chem. Eng. J. 2015. V. 282. P. 11–19; DOI: 10.1016/j.cej.2015.03.017*
32. *Чумаков Г. А., Чумакова Н. А. О локализации неустойчивого решения одной системы трёх нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений с малым параметром // Сиб. журн. индустр. матем. 2022. Т. 25, № 4. С. 221–238; DOI: 10.33048/SIBJIM.2022.25.417*
33. *Быков В. И., Цыбенова С. Б. Реализация метода продолжения по параметру для системы двух уравнений // Вычисл. технол. 2002. Т. 7, № 5. С. 21–28.*
34. *Понтрягин Л. С., Родыгин Л. В. Периодическое решение одной системы обыкновенных дифференциальных уравнений с малым параметром при производных // Доклады АН СССР. 1960. Т. 132, № 3. С. 537–540.*

UDC 517.928.4:517.929.5

DIFFERENTIAL EQUATIONS WITH A SMALL PARAMETER AND
MULTIPEAK OSCILLATIONS© 2024 G. A. Chumakov^{1,3a}, N. A. Chumakova^{2,3b}¹*Sobolev Institute of Mathematics, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences,
Novosibirsk, 630090 Russia,*²*Boreskov Institute of Catalysis, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences,
Novosibirsk, 630090 Russia,*³*Novosibirsk State University, Novosibirsk, 630090 Russia*E-mails: ^achumakov@math.nsc.ru, ^bchum@catalysis.ru

Received 25.09.2023, revised 21.01.2024, accepted 07.02.2024

Abstract. In this paper, we study a nonlinear dynamical system of autonomous ordinary differential equations with a small parameter μ such that two variables x and y are fast and another one z is slow. If we take the limit as $\mu \rightarrow 0$, then this becomes a “*degenerate system*” included in the one-parameter family of two-dimensional subsystems of *fast motions* with the parameter z in some interval. It is assumed that in each subsystem there exists a *structurally stable* limit cycle l_z . In addition, in the *complete* dynamical system there is some structurally stable periodic orbit L that tends to a limit cycle l_{z_0} for some $z = z_0$ as μ tends to zero. We can define the first return map, or the Poincaré map, on a local cross section in the hyperplane (y, z) orthogonal to L at some point. We prove that the Poincaré map has an invariant manifold for the fixed point corresponding to the periodic orbit L on a guaranteed interval over the variable y , and the interval length is separated from zero as μ tends to zero. The proved theorem allows one to formulate some sufficient conditions for the existence and/or absence of multipeak oscillations in the complete dynamical system. As an example of application of the obtained results, we consider some kinetic model of the catalytic reaction of hydrogen oxidation on nickel.

Keywords: ordinary differential equation, small parameter, limit cycle, invariant manifold, Poincaré map, kinetic model, multipeak self-oscillations.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.107

REFERENCES

1. A. M. Zhabotinskii, *Concentration Self-Oscillations* (Nauka, Moscow, 1974) [in Russian].
2. D. Gurel and O. Gurel, *Oscillations in Chemical Reactions* (Springer-Verlag, Berlin—Heidelberg—New York—Tokyo, 1983; Mir, Moscow, 1986).
3. G. Ertl, “Oscillatory catalytic reactions at single-crystal surfaces,” *Adv. Catal.* **37**, 213–277 (1990).
4. F. Schüth, B. E. Henry, and L. D. Schmidt, “Oscillatory reactions in heterogeneous catalysis,” *Adv. Catal.* **39**, 51–127 (1993).
5. R. Imbihl, “Oscillatory reactions on single-crystal surfaces,” *Prog. Surf. Sci.* **44**, 185–343 (1993).
6. R. Imbihl and G. Ertl, “Oscillatory kinetics in heterogeneous catalysis,” *Chem. Rev.* **95** (3), 697–733 (1995). <https://doi.org/10.1021/cr00035a012>
7. M. M. Slinko and N. I. Jaeger, *Oscillating Heterogeneous Catalytic Systems* (Elsevier, Amsterdam, 1994).
8. V. D. Belyaev, M. M. Slinko, M. G. Slinko, and V. I. Timoshenko, “Self-oscillations in the heterogeneous catalytic reaction of hydrogen with oxygen,” *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **214** (5), 1098–1100 (1974) [in Russian].

9. M. G. Slinko, "Dynamics of chemical processes and reactors," *Khim. Prom-st.* (11), 260–268 (1979) [in Russian].
10. E. S. Kurkina, N. V. Peskov, M. M. Slinko, and M. G. Slinko, "On the nature of chaotic fluctuations in the rate of the CO oxidation reaction on a Pd-zeolite catalyst," *Dokl. Ross. Akad. Nauk* **351** (4), 497–501 (1996) [in Russian].
11. E. A. Lashina, V. V. Kaichev, N. A. Chumakova, V. V. Ustyugov, G. A. Chumakov, and V. I. Bukhtiyarov, "Mathematical simulation of self-oscillations in methane oxidation on nickel: An isothermal model," *Kinet. Catal.* **53**, 374–383 (2012). <https://doi.org/10.1134/S0023158412030081>
12. E. A. Lashina, V. V. Kaichev, A. A. Saraev, Z. S. Vinokurov, N. A. Chumakova, G. A. Chumakov, and V. I. Bukhtiyarov, "Experimental study and mathematical modeling of self-sustained kinetic oscillations in catalytic oxidation of methane over nickel," *J. Phys. Chem. A* **121**, 6874–6886 (2017). <https://doi.org/10.1021/acs.jpca.7b04525>
13. E. A. Lashina, V. V. Kaichev, A. A. Saraev, N. A. Chumakova, G. A. Chumakov, and V. I. Bukhtiyarov, "Self-sustained oscillations in oxidation of propane over nickel: Experimental study and mathematical modelling," *Top. Catal.* **63** (1–2), 33–48 (2020). <https://doi.org/10.1007/s11244-019-01219-5>
14. A. A. Andronov, E. A. Leontovich, I. I. Gordon, and A. G. Mayer, *Qualitative Theory of Second-Order Dynamical Systems* (Nauka, Moscow, 1966) [in Russian].
15. P. Hartman, *Ordinary Differential Equations* (John Wiley & Sons, New York–London–Sydney, 1964; Mir, Moscow, 1970).
16. T. Poston and I. Stuart, *Catastrophe Theory and Its Applications* (Pitman, London–San Francisco, 1978; Mir, Moscow, 1980).
17. C. Robinson, *Dynamical Systems: Stability, Symbolic Dynamics, and Chaos* (CRC Press, Boca Raton, 1995).
18. L. P. Shil'nikov, A. L. Shil'nikov, D. V. Turaev, and L. Chua, *Methods of Qualitative Theory in Nonlinear Dynamics. Part 1* (World Scientific, Singapore, 1998; Inst. Komp'yut. Issled., Moscow–Izhevsk, 2004).
19. L. P. Shil'nikov, A. L. Shil'nikov, D. V. Turaev, and L. Chua, *Methods of Qualitative Theory in Nonlinear Dynamics. Part 2* (World Scientific, Singapore, 2001; Inst. Komp'yut. Issled., Moscow–Izhevsk, 2009).
20. A. Abbondandolo, L. Asselle, G. Benedetti, M. Mazzucchelli, and I. A. Taimanov, "The multiplicity problem for periodic orbits of magnetic flows on the 2-sphere," *Adv. Nonlinear Stud.* **17** (1), 17–30 (2017). <https://doi.org/10.1515/ans-2016-6003>
21. A. K. Zvonkin and M. A. Shubin, "Non-standard analysis and singular perturbations of ordinary differential equations," *Russ. Math. Surv.* **39** (2), 69–131 (1984).
22. A. B. Vasil'eva and V. F. Butuzov, *Asymptotic Methods in the Theory of Singular Perturbations* (Vyssh. Shkola, Moscow, 1990) [in Russian].
23. H. G. Solari, M. A. Natiello, and G. B. Mindlin, *Nonlinear Dynamics: A Two-way Trip from Physics to Math* (Inst. Phys., London–Bristol–Philadelphia, 1996).
24. Yu. A. Kuznetsov, *Elements of Applied Bifurcation Theory* (Springer, New York, 1998).
25. J. Guckenheimer and P. Holmes, *Nonlinear Oscillations, Dynamical Systems, and Bifurcations of Vector Fields* (Springer, New York, 1983; Inst. Komp'yut. Issled., Moscow–Izhevsk, 2002).
26. G. A. Chumakov, M. G. Slinko, and V. D. Belyaev, "Complex changes in the rate of heterogeneous catalytic reactions," *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **253** (3), 653–658 (1980) [in Russian].
27. G. A. Chumakov and M. G. Slinko, "Kinetic turbulence (chaos) of the reaction rate of interaction of hydrogen with oxygen over metal catalysts," *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **266** (5), 1194–1198 (1982) [in Russian].
28. G. A. Chumakov and N. A. Chumakova, "Relaxation oscillations in a kinetic model of catalytic hydrogen oxidation involving a chase on canards," *Chem. Eng. J.* **91**, 151–158 (2003). [https://doi.org/10.1016/S1385-8947\(02\)00148-1](https://doi.org/10.1016/S1385-8947(02)00148-1)
29. G. A. Chumakov, "Mathematical aspects of modeling the self-oscillations of the heterogeneous catalytic reaction rate. I," *Sib. Math. J.* **46** (5), 948–956 (2005). <https://doi.org/10.1007/s11202-005-0091-1>
30. G. A. Chumakov, "Dynamics of a system of nonlinear differential equations," *Sib. Math. J.* **48** (5), 949–960 (2007). <https://doi.org/10.1007/s11202-007-0098-x>

31. G. A. Chumakov, N. A. Chumakova, and E. A. Lashina, "Modeling the complex dynamics of heterogeneous catalytic reactions with fast, intermediate, and slow variables," *Chem. Eng. J.* **282**, 11–19 (2015). <https://doi.org/10.1016/j.cej.2015.03.017>
32. G. A. Chumakov and N. A. Chumakova, "Localization of an unstable solution of a system of three nonlinear ordinary differential equations with a small parameter," *J. Appl. Ind. Math.* **16** (4), 606–620 (2022). <https://doi.org/10.1134/S1990478922040032>
33. V. I. Bykov and S. B. Tsybenova, "Implementation of the parameter continuation method for a system of two equations," *Vychisl. Tekhnol.* **7** (5), 21–28 (2002) [in Russian].
34. L. S. Pontryagin and L. V. Rodygin, "Periodic solution of one system of ordinary differential equations with a small parameter multiplying the derivatives," *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **132** (3), 537–540 (1960) [in Russian].

УДК 532.517.4

МИГРАЦИОННЫЙ СКОРОСТНОЙ АНАЛИЗ ПО ЛУЧЕВОЙ АСИМПТОТИКЕ УРАВНЕНИЯ ДВОЙНОГО КОРНЯ

© 2024 Н. Н. Шилов^{1a}, А. А. Дучков^{2b}¹Новосибирский государственный университет,
ул. Пирогова, 1, г. Новосибирск 630090, Россия,²Институт нефтегазовой геологии и геофизики им. А. А. Трофимука СО РАН,
просп. Акад. Коптюга, 3, г. Новосибирск 630090, РоссияE-mails: ^an.shilov@g.nsu.ru, ^bDuchkovAA@ipgg.sbras.ruПоступила в редакцию 17.04.2023 г.; после доработки 02.05.2023 г.;
принята к публикации 07.06.2023 г.

Сейсмические изображения геологической среды являются основным результатом обработки полевых данных сейсморазведки. Качество изображений зависит от точности имеющейся скоростной модели. В данной работе строится градиентный алгоритм уточнения скоростной модели, основанный на высокочастотной лучевой асимптотике уравнения двойного корня — особой аппроксимации волнового уравнения, описывающей однократно-отражённые волны. Следуя принципам оценки точности скоростной модели, принятым в сейсмической миграции, мы построили целевой функционал и вывели систему уравнений для нахождения его градиента относительно параметров скоростной модели. Метод протестирован на незашумлённых модельных данных в двумерной постановке задачи.

Ключевые слова: обратная задача сейсморазведки, скоростной анализ, уравнение двойного корня, лучевой метод, теория возмущений.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.108

ВВЕДЕНИЕ

Сейсморазведка активно используется для изучения внутреннего строения Земли по данным регистрации отражённых волн [1]. Исторически сложились две группы методов восстановления скоростной модели среды: одни нацелены на восстановление гладких распределений скорости (скоростной анализ), а другие — на восстановление разрывов (миграция). Эти методы занимают разное место в графе обработки данных, и, в частности, точность сейсмической миграции определяется точностью построения гладкой скоростной модели [2].

Среди методов скоростного анализа выделяются два подхода, отличающиеся друг от друга выбором критерия оптимизации: сейсмическая томография (подбор скоростной модели, удовлетворяющей зарегистрированным данным [3]) и миграционный скоростной анализ (подбор скоростной модели, удовлетворяющей физике отражения: лучи падающих и отражённых волн сходятся в точках отражения, а положение этих точек не зависит от углов падения [4,5]). Соответственно, отличаются прямые задачи, которые решаются в процессе подбора. В томографических подходах на каждом шаге решаются задачи моделирования, а в миграционном скоростном анализе — задачи продолжения данных.

Продолжение данных в нижнее полупространство играет ключевую роль в сейсмической миграции. Оно реализуется как решение волнового уравнения или его аппроксимаций в обратном времени — конечно-разностным [4,6] или асимптотическим методом [7,8]. В данной статье разрабатывается алгоритм миграционного скоростного анализа на основе высокочастотной асимптотики одной из аппроксимаций волнового уравнения.

1. ПОСТАНОВКА ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

1.1. Характеристическое уравнение DSR

Рассмотрим двумерное полупространство $z \geq 0$, в котором задано гладкое распределение скорости упругих волн $v(x, z)$. Пусть на верхней границе этого полупространства в координатах x_s и x_r соответственно расставлены источники и приёмники сейсмических волн. Пусть также известно время пробега однократно-отражённой волны как функция горизонтальных координат источника и приёмника, а также — формально — глубины системы наблюдений: $\tau(x_s, x_r, z = 0)$. Эта функция удовлетворяет принципу взаимности

$$\tau(x_s, x_r, z) = \tau(x_r, x_s, z)$$

и особой форме уравнения эйконала:

$$\frac{\partial \tau}{\partial z} = -\sqrt{\frac{1}{v(x_s, z)^2} - \left(\frac{\partial \tau}{\partial x_s}\right)^2} - \sqrt{\frac{1}{v(x_r, z)^2} - \left(\frac{\partial \tau}{\partial x_r}\right)^2}, \quad (1)$$

впервые полученной в работе [7]. При выводе этого уравнения предполагалось, что оба подкоренных выражения положительны. Физически это означает, что лучи падающих и отражённых волн нигде не становятся горизонтальными. В нашей работе мы будем придерживаться того же предположения, но в дальнейшем вместо полной записи $v(x_s, z)$ и $v(x_r, z)$ будем пользоваться короткими обозначениями:

$$v_s = v(x_s, z), \quad v_r = v(x_r, z).$$

Уравнение (1) описывает кинематику сейсмических волн в пространстве данных (x_s, x_r, z) . Его решение задаёт время пробега волны из точки $(x_s, z)^T$ вниз до отражающей границы и обратно в точку $(x_r, z)^T$ (верхний индекс T указывает на транспонирование). Оно нашло применение в области сейсмической миграции, где ему ставится в соответствие то или иное псевдодифференциальное уравнение (уравнение двойного корня, англ. Double Square Root Equation), позволяющее пересчитывать записанное волновое поле в нижнее полупространство и строить изображения отражающих границ [4]. Как и для ряда других уравнений, описывающих волновые процессы, для уравнения двойного корня можно построить лучевую асимптотику и использовать её для решения прямых и обратных задач.

1.2. Лучи уравнения DSR

Следуя обозначениям лучевого метода, введём вектор координат и вектор медленности:

$$\vec{x} = (x_s, x_r, z)^T,$$

$$\vec{p} = (p_s, p_r, p_z)^T = \nabla_{\vec{x}} \tau = \left(\frac{\partial \tau}{\partial x_s}, \frac{\partial \tau}{\partial x_r}, \frac{\partial \tau}{\partial z} \right)^T.$$

Здесь и далее оператор ∇ будет использоваться для обозначения градиента, а нижний индекс около него будет указывать, по каким координатам берутся частные производные. В отличие от вектора координат и медленности в физическом пространстве, в пространстве данных векторы $\vec{x}$ и $\vec{p}$ не соответствуют какой-то одной физической точке и направлению — они задают положение пары “источник-приёмник” на некоторой глубине и скорость изменения времени пробега отражённой волны при независимых горизонтальных перемещениях источника и приёмника или при одновременном их погружении в вертикальном направлении.

По уравнению эйконала (1) можно построить несколько разных гамильтонианов [8], причём разные формы гамильтониана будут соответствовать разным параметризациям лучей. В

нашей работе потребуется трассировать лучи в обратном времени, и поэтому мы будем пользоваться гамильтонианом, предложенным в [9]:

$$H(\vec{x}, \vec{p}) = C_\tau(\vec{x}, \vec{p}) H_0(\vec{x}, \vec{p}), \quad (2)$$

где

$$C_\tau(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{1}{\frac{1}{v_s^2 \sqrt{\frac{1}{v_s^2} - p_s^2}} + \frac{1}{v_r^2 \sqrt{\frac{1}{v_r^2} - p_r^2}}}, \quad (3)$$

$$H_0(\vec{x}, \vec{p}) = - \left(p_z + \sqrt{\frac{1}{v_s^2} - p_s^2} + \sqrt{\frac{1}{v_r^2} - p_r^2} \right).$$

Такой гамильтониан задаёт систему уравнений луча, параметризованного временем пробега отражённой волны:

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{x}}{d\tau} &= \nabla_{\vec{p}} H, \\ \frac{d\vec{p}}{d\tau} &= -\nabla_{\vec{x}} H. \end{aligned} \quad (4)$$

Выражения для производных гамильтониана мы вынесли в приложение.

Решения этой системы — пары $(\vec{x}(\tau), \vec{p}(\tau))$ — мы будем называть лучами. Начальные условия мы будем задавать на поверхности измерений $z = 0$. Зафиксировав источник x_s^{obs} , приёмник x_r^{obs} , время пробега $\tau_{obs} = \tau(x_s^{obs}, x_r^{obs}, 0)$ и его производные по горизонтальным координатам, можно выразить неизвестную вертикальную компоненту медленности из уравнения эйконала (1) и получить начальные условия в следующей форме:

$$\vec{x}|_{\tau=\tau_{obs}} = \begin{pmatrix} x_s^{obs} \\ x_r^{obs} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \vec{p}|_{\tau=\tau_{obs}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \tau_{obs}}{\partial x_s} \\ \frac{\partial \tau_{obs}}{\partial x_r} \\ -\sqrt{\frac{1}{v_s^2} - p_s^2} \Big|_{\tau=\tau_{obs}} - \sqrt{\frac{1}{v_r^2} - p_r^2} \Big|_{\tau=\tau_{obs}} \end{pmatrix}. \quad (5)$$

По построению, при таких начальных значениях $\vec{x}$ и $\vec{p}$ выполнено уравнение эйконала, и гамильтониан равен нулю. Эти свойства будут сохраняться вдоль всего луча как вдоль решения гамильтоновой системы.

1.3. Постановка обратной задачи

Мы будем решать систему уравнений луча (4) с начальными условиями (5) в обратном времени, от $\tau = \tau_{obs}$ до $\tau = 0$. Нулевое время пробега отражённой волны означает, что волна мгновенно прошла весь путь от источника до приёмника. Физически это реализуется, только когда источник и приёмник совмещены и находятся непосредственно в точке отражения, на самой поверхности раздела сред. Такие соображения можно использовать как критерий точности скоростной модели [5]. В терминах лучей уравнения двойного корня мы будем считать, что скоростная модель некорректна, если $x_s|_{\tau=0} \neq x_r|_{\tau=0}$. Этот принцип проиллюстрирован на рис. 1.

Пусть система наблюдений состоит из K пар источников и приёмников в координатах x_s^k и x_r^k соответственно, $k = \overline{1, K}$. Обозначим для каждой пары измеренное время пробега волны за τ_{obs}^k , а его производные по горизонтальным координатам — за $\frac{\partial \tau_{obs}^k}{\partial x_s}$ и $\frac{\partial \tau_{obs}^k}{\partial x_r}$. Построим по

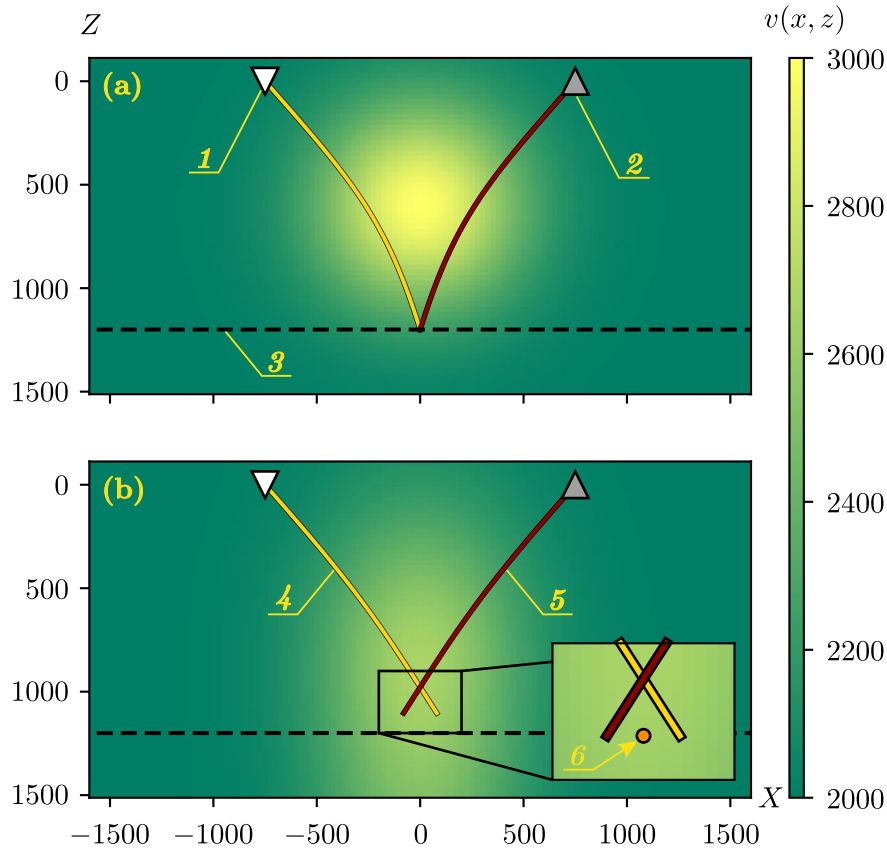


Рис. 1. Принцип оптимизации: (а) корректная скоростная модель ($v(x, z)$ [м/с], Z [м], X [м]), (б) некорректная скоростная модель. Условные обозначения: 1 — источник, 2 — приёмник, 3 — истинное положение отражающей границы, 4 — падающий луч $(x_s, z)^T$, 5 — отражённый луч $(x_r, z)^T$, 6 — средняя точка, приблизительное положение точки отражения

этим данным лучи уравнения двойного корня, используя систему (4) и начальные условия (5). Обозначим за h_k расстояния между $x_s^k|_{\tau=0}$ и $x_r^k|_{\tau=0}$:

$$h_k = (x_r^k - x_s^k)|_{\tau=0}. \quad (6)$$

Величины h_k зависят от скоростной модели $v(x, z)$. Составим функционал невязки:

$$L(v) = \frac{1}{K} \sum_{k=1}^K h_k^2(v). \quad (7)$$

Этот функционал неотрицателен и в истинной скоростной модели принимает нулевое значение. Сформулируем обратную задачу:

Обратная задача DSR. Построить скоростную модель $\tilde{v}(x, z)$, в которой функционал (7) примет минимальное значение.

Мы будем искать её решение методом градиентного спуска в некотором классе скоростных моделей $v(x, z; \vec{c})$, параметризованных набором чисел $\vec{c} = (c_1, c_2, \dots, c_M)^T$. Заметим, что в случае произвольно сложного строения среды решение может и не существовать из-за условия на нигде-не-горизонтальное распространение волн, необходимого для использования уравнения эйконала (1). Единственность решения в случае умеренно-неоднородных сред, по-видимому,

зависит от количества отражающих границ в модели. В следующем разделе мы построим систему уравнений, позволяющую оценить чувствительность лучей к возмущениям скоростной модели, уточним выбор параметризации решения и, наконец, составим формулу для расчёта градиента целевого функционала.

Замечание

Даже если скоростная модель не совсем верна, но близка к истинной, то координаты средней точки

$$m_x^k = \frac{x_r^k + x_s^k}{2} \Big|_{\tau=0}, \quad m_z^k = z^k \Big|_{\tau=0} \quad (8)$$

будут указывать на приблизительные положение точки отражения. Таким образом, построив все K лучей уравнения двойного корня, можно оценить форму отражающей границы. Тем не менее, если модель плохо приближает истинное распределение скоростей, то “видимая” лучами форма границы может исказиться. Пример одной средней точки изображён в нижней части рис. 1.

2. ГРАДИЕНТ ЦЕЛЕВОГО ФУНКЦИОНАЛА

2.1. Система возмущений луча DSR

Рассмотрим луч уравнения двойного корня $(\vec{x}(\tau), \vec{p}(\tau))$, построенный в модели $v(x, z)$. Внесём в скоростную модель малое возмущение $\delta v(x, z)$. Оно повлечёт малые возмущения в гамильтониане $H(\vec{x}, \vec{p})$, траектории луча $\vec{x}(\tau)$ и медленности $\vec{p}(\tau)$:

$$\begin{aligned} H &\rightarrow H + \delta H, \\ v \rightarrow v + \delta v &\implies \begin{aligned} \vec{x} &\rightarrow \vec{x} + \delta \vec{x}, \\ \vec{p} &\rightarrow \vec{p} + \delta \vec{p}, \end{aligned} \end{aligned}$$

причём δH линейно зависит от возмущений луча и скоростной модели:

$$\delta H(\vec{x}, \vec{p}; \delta \vec{x}, \delta \vec{p}, \delta v_s, \delta v_r) = \nabla_{\vec{x}} H \cdot \delta \vec{x} + \nabla_{\vec{p}} H \cdot \delta \vec{p} + \frac{\partial H}{\partial v_s} \delta v_s + \frac{\partial H}{\partial v_r} \delta v_r, \quad (9)$$

где δv_s и δv_r определяются аналогично v_s и v_r , а производные гамильтониана по скоростям находятся путём символического дифференцирования (2) по v_s и v_r как по независимым переменным.

Запишем систему уравнений возмущённого луча:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau}(\vec{x} + \delta \vec{x}) &= \nabla_{\vec{p}}(H + \delta H), \\ \frac{d}{d\tau}(\vec{p} + \delta \vec{p}) &= -\nabla_{\vec{x}}(H + \delta H). \end{aligned}$$

Напомним, что на исходном луче $(\vec{x}, \vec{p})$ выполнена система (4) с невозмущённым гамильтонианом в правой части. Сократив соответствующие слагаемые, мы получим систему возмущений луча:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\tau} \delta \vec{x} &= \nabla_{\vec{p}} \delta H = \nabla_{\vec{p}} \nabla_{\vec{x}} H \cdot \delta \vec{x} + \nabla_{\vec{p}} \nabla_{\vec{p}} H \cdot \delta \vec{p} + \nabla_{\vec{p}} \frac{\partial H}{\partial v_s} \delta v_s + \nabla_{\vec{p}} \frac{\partial H}{\partial v_r} \delta v_r, \\ \frac{d}{d\tau} \delta \vec{p} &= -\nabla_{\vec{x}} \delta H = -\nabla_{\vec{x}} \nabla_{\vec{x}} H \cdot \delta \vec{x} - \nabla_{\vec{x}} \nabla_{\vec{p}} H \cdot \delta \vec{p} - \nabla_{\vec{x}} \frac{\partial H}{\partial v_s} \delta v_s - \nabla_{\vec{x}} \frac{\partial H}{\partial v_r} \delta v_r, \end{aligned} \quad (10)$$

в которой операторы $\nabla_{\vec{x}}\nabla_{\vec{x}}$, $\nabla_{\vec{p}}\nabla_{\vec{p}}$ и $\nabla_{\vec{x}}\nabla_{\vec{p}} = \nabla_{\vec{p}}\nabla_{\vec{x}}^T$ действуют как

$$\nabla_{\vec{x}}\nabla_{\vec{x}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x_s^2} & \frac{\partial^2}{\partial x_s \partial x_r} & \frac{\partial^2}{\partial x_s \partial z} \\ \frac{\partial^2}{\partial x_r \partial x_s} & \frac{\partial^2}{\partial x_r^2} & \frac{\partial^2}{\partial x_r \partial z} \\ \frac{\partial^2}{\partial z \partial x_s} & \frac{\partial^2}{\partial z \partial x_r} & \frac{\partial^2}{\partial z^2} \end{pmatrix}, \quad \nabla_{\vec{p}}\nabla_{\vec{p}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial p_s^2} & \frac{\partial^2}{\partial p_s \partial p_r} & \frac{\partial^2}{\partial p_s \partial p_z} \\ \frac{\partial^2}{\partial p_r \partial p_s} & \frac{\partial^2}{\partial p_r^2} & \frac{\partial^2}{\partial p_r \partial p_z} \\ \frac{\partial^2}{\partial p_z \partial p_s} & \frac{\partial^2}{\partial p_z \partial p_r} & \frac{\partial^2}{\partial p_z^2} \end{pmatrix},$$

$$\nabla_{\vec{x}}\nabla_{\vec{p}} = \nabla_{\vec{p}}\nabla_{\vec{x}}^T = \begin{pmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x_s \partial p_s} & \frac{\partial^2}{\partial x_s \partial p_r} & \frac{\partial^2}{\partial x_s \partial p_z} \\ \frac{\partial^2}{\partial x_r \partial p_s} & \frac{\partial^2}{\partial x_r \partial p_r} & \frac{\partial^2}{\partial x_r \partial p_z} \\ \frac{\partial^2}{\partial z \partial p_s} & \frac{\partial^2}{\partial z \partial p_r} & \frac{\partial^2}{\partial z \partial p_z} \end{pmatrix}.$$

Запишем уравнения (10) в матричной форме:

$$\frac{d}{d\tau} \begin{pmatrix} \delta\vec{x} \\ \delta\vec{p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nabla_{\vec{p}}\nabla_{\vec{x}}H & \nabla_{\vec{p}}\nabla_{\vec{p}}H \\ -\nabla_{\vec{x}}\nabla_{\vec{x}}H & -\nabla_{\vec{x}}\nabla_{\vec{p}}H \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \delta\vec{x} \\ \delta\vec{p} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ -\mathbf{C} & -\mathbf{D} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \delta\vec{v}_s \\ \delta\vec{v}_r \end{pmatrix}, \quad (11)$$

где за $\delta\vec{v}_s$ и $\delta\vec{v}_r$ обозначены векторы

$$\delta\vec{v}_s = \begin{pmatrix} \delta v_s \\ \frac{\partial}{\partial x_s} \delta v_s \\ \frac{\partial}{\partial z} \delta v_s \end{pmatrix}, \quad \delta\vec{v}_r = \begin{pmatrix} \delta v_r \\ \frac{\partial}{\partial x_r} \delta v_r \\ \frac{\partial}{\partial z} \delta v_r \end{pmatrix},$$

а матрицы $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$ и $\mathbf{D}$ имеют следующую структуру:

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial p_s} \frac{\partial H}{\partial v_s} & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial p_r} \frac{\partial H}{\partial v_s} & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial p_z} \frac{\partial H}{\partial v_s} & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial p_s} \frac{\partial H}{\partial v_r} & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial p_r} \frac{\partial H}{\partial v_r} & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial p_z} \frac{\partial H}{\partial v_r} & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{C} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_s} \frac{\partial H}{\partial v_s} & \frac{\partial H}{\partial v_s} & 0 \\ \frac{\partial}{\partial x_r} \frac{\partial H}{\partial v_s} & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial H}{\partial v_s} & 0 & \frac{\partial H}{\partial v_s} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{D} = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial x_s} \frac{\partial H}{\partial v_r} & 0 & 0 \\ \frac{\partial}{\partial x_r} \frac{\partial H}{\partial v_r} & \frac{\partial H}{\partial v_r} & 0 \\ \frac{\partial}{\partial z} \frac{\partial H}{\partial v_r} & 0 & \frac{\partial H}{\partial v_r} \end{pmatrix}.$$

Система (11) — линейная неоднородная; обозначим за $\mathbf{P}(\tau)$ фундаментальную матрицу её однородной части. Выразим через неё возмущение луча в нулевой момент времени:

$$\begin{pmatrix} \delta\vec{x} \\ \delta\vec{p} \end{pmatrix} \Big|_{\tau=0} = \mathbf{P}^{-1}(\tau_{obs}) \cdot \begin{pmatrix} \delta\vec{x} \\ \delta\vec{p} \end{pmatrix} \Big|_{\tau=\tau_{obs}} - \int_0^{\tau_{obs}} \mathbf{P}^{-1}(\tau') \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ -\mathbf{C} & -\mathbf{D} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \delta\vec{v}_s \\ \delta\vec{v}_r \end{pmatrix} d\tau'. \quad (12)$$

Для постановки условий в точке $\tau = \tau_{obs}$ мы будем считать, что положения источника и приёмника зафиксированы, а измерения на поверхности не зависят от возмущений скоростной модели:

$$\delta\vec{x}|_{\tau=\tau_{obs}} = \vec{0}, \quad \delta p_s|_{\tau=\tau_{obs}} = \delta \frac{\partial \tau_{obs}}{\partial x_s} = 0, \quad \delta p_r|_{\tau=\tau_{obs}} = \delta \frac{\partial \tau_{obs}}{\partial x_r} = 0. \quad (13)$$

Кроме того, мы будем искать решения системы (10), на которых равен нулю возмущённый гамильтониан:

$$H(\vec{x}, \vec{p}) + \delta H(\vec{x}, \vec{p}; \delta \vec{x}, \delta \vec{p}) = 0.$$

Подставим сюда δH из (9) и выразим δp_z , учитывая, что $H(\vec{x}, \vec{p}) \equiv 0$ на невозмущённом луче:

$$\delta p_z = - \left(\nabla_{\vec{x}} H \cdot \delta \vec{x} + \frac{\partial H}{\partial p_s} \delta p_s + \frac{\partial H}{\partial p_r} \delta p_r + \frac{\partial H}{\partial v_s} \delta v_s + \frac{\partial H}{\partial v_r} \delta v_r \right) \left(\frac{\partial H}{\partial p_z} \right)^{-1}.$$

Наконец, подставляя возмущения координат и медленности из (13), получим условие на $\delta p_z|_{\tau=\tau_{obs}}$:

$$\delta p_z|_{\tau=\tau_{obs}} = - \left(\frac{\partial H}{\partial v_s} \delta v_s + \frac{\partial H}{\partial v_r} \delta v_r \right) \left(\frac{\partial H}{\partial p_z} \right)^{-1} \Big|_{\tau=\tau_{obs}}. \quad (14)$$

Система (10) с условиями (13) и (14) позволяет протрассировать возмущения луча от поверхности наблюдений до нулевого времени отражения при заданных возмущениях скоростной модели. В частности, решив её для k -го луча, можно рассчитать возмущение h_k из функционала невязки (7) как разницу возмущений x_r^k и x_s^k при нулевом времени отражения.

2.2. Параметризация модели

Введём некоторые ограничения на скоростную модель. Сузим её область определения до прямоугольника, симметричного относительно некоторой точки $(\bar{x}, \bar{z})^T$:

$$x \in [\bar{x} - d_x, \bar{x} + d_x], \quad z \in [\bar{z} - d_z, \bar{z} + d_z],$$

где числа $d_x > 0$ и $d_z > 0$ задают размеры прямоугольника. Введём замену координат:

$$\tilde{x} = \frac{x - \bar{x}}{d_x}, \quad \tilde{z} = \frac{z - \bar{z}}{d_z}.$$

Аналогичную замену мы будем использовать для координат источника и приёмника: $\tilde{x}_s$ и $\tilde{x}_r$. Заметим, что преобразованные координаты безразмерны, а их значения лежат в диапазоне от -1 до 1 .

Как уже отмечалось выше, мы будем минимизировать функционал (7) в классе скоростных моделей, параметризованных некоторым набором чисел. Более конкретно, мы будем искать решение задачи оптимизации в виде

$$v(x, z; \vec{c}) = v_0(x, z) + \sum_{i=0}^{M-1} \sum_{j=0}^{N-1} c_{ij} T_i(\tilde{x}) T_j(\tilde{z}), \quad (15)$$

где за $v_0(x, z)$ обозначено фиксированное начальное приближение, за T_n — полиномы Чебышёва 1-го рода степени n , а за c_{ij} — неизвестные коэффициенты разложения (мы будем обозначать весь набор этих коэффициентов за $\vec{c}$, хотя в данном случае ими можно заполнить двумерный массив).

2.3. Градиент целевого функционала

Пусть возмущение скоростной модели $\delta v(x, z)$ вызвано малым приращением коэффициента c_{ij} . Тогда:

$$\delta v(x, z) = \frac{\partial v}{\partial c_{ij}} \delta c_{ij} = T_i(\tilde{x}) T_j(\tilde{z}) \delta c_{ij}.$$

Начальные условия (13), (14) преобразуются к виду

$$\delta \vec{x}|_{\tau=\tau_{obs}} = \frac{\partial \vec{x}}{\partial c_{ij}} \Big|_{\tau=\tau_{obs}} \delta c_{ij}, \quad \delta \vec{p}|_{\tau=\tau_{obs}} = \frac{\partial \vec{p}}{\partial c_{ij}} \Big|_{\tau=\tau_{obs}} \delta c_{ij}$$

с частными производными

$$\left. \frac{\partial \vec{x}}{\partial c_{ij}} \right|_{\tau=\tau_{obs}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left. \frac{\partial \vec{p}}{\partial c_{ij}} \right|_{\tau=\tau_{obs}} = - \left(\frac{\partial H}{\partial p_z} \right)^{-1} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{\partial H}{\partial v_s} T_i(\tilde{x}_s) T_j(\tilde{z}) + \frac{\partial H}{\partial v_r} T_i(\tilde{x}_r) T_j(\tilde{z}) \end{pmatrix} \bigg|_{\tau=\tau_{obs}},$$

а векторы $\delta \vec{v}_s$ и $\delta \vec{v}_r$ — к виду

$$\delta \vec{v}_s = \frac{\partial \vec{v}_s}{\partial c_{ij}} \delta c_{ij} = \begin{pmatrix} T_i(\tilde{x}_s) T_j(\tilde{z}) \\ \frac{1}{d_x} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_s} T_i(\tilde{x}_s) T_j(\tilde{z}) \\ \frac{1}{d_z} \frac{\partial}{\partial \tilde{z}} T_i(\tilde{x}_s) T_j(\tilde{z}) \end{pmatrix} \delta c_{ij}, \quad \delta \vec{v}_r = \frac{\partial \vec{v}_r}{\partial c_{ij}} \delta c_{ij} = \begin{pmatrix} T_i(\tilde{x}_r) T_j(\tilde{z}) \\ \frac{1}{d_x} \frac{\partial}{\partial \tilde{x}_r} T_i(\tilde{x}_r) T_j(\tilde{z}) \\ \frac{1}{d_z} \frac{\partial}{\partial \tilde{z}} T_i(\tilde{x}_r) T_j(\tilde{z}) \end{pmatrix} \delta c_{ij}.$$

Подставляя эти выражения в (12) и сокращая δc_{ij} , можно рассчитать производные $\frac{\partial \vec{x}}{\partial c_{ij}}$ и $\frac{\partial \vec{p}}{\partial c_{ij}}$ в нулевой момент времени:

$$\left. \frac{\partial}{\partial c_{ij}} \begin{pmatrix} \vec{x} \\ \vec{p} \end{pmatrix} \right|_{\tau=0} = \mathbf{P}^{-1}(\tau_{obs}) \cdot \left. \frac{\partial}{\partial c_{ij}} \begin{pmatrix} \vec{x} \\ \vec{p} \end{pmatrix} \right|_{\tau=\tau_{obs}} - \int_0^{\tau_{obs}} \mathbf{P}^{-1}(\tau') \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ -\mathbf{C} & -\mathbf{D} \end{pmatrix} \cdot \frac{\partial}{\partial c_{ij}} \begin{pmatrix} \vec{v}_s \\ \vec{v}_r \end{pmatrix} d\tau'.$$

Наконец, отсюда без труда находится производная целевого функционала (7) относительно возмущения коэффициента c_{ij} :

$$\frac{\partial L}{\partial c_{ij}} = \frac{1}{K} \frac{\partial}{\partial c_{ij}} \sum_{k=1}^K h_k^2 = \frac{2}{K} \sum_{k=1}^K h_k \frac{\partial h_k}{\partial c_{ij}},$$

в котором

$$\frac{\partial h_k}{\partial c_{ij}} = \left. \frac{\partial x_r^k}{\partial c_{ij}} \right|_{\tau=0} - \left. \frac{\partial x_s^k}{\partial c_{ij}} \right|_{\tau=0}.$$

По этим формулам можно рассчитать производные для всех c_{ij} . Причём отметим, что матрицы $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$, $\mathbf{C}$, $\mathbf{D}$ и $\mathbf{P}$ не зависят от выбора конкретного коэффициента и что этот расчёт можно производить параллельно.

Замечание

Наш выбор базисных функций не является результатом оптимизации; мы руководствовались тремя простыми соображениями:

- полиномы Чебышёва образуют ортогональный базис,
- полиномы Чебышёва являются дважды гладкими функциями,
- разложение по полиномам Чебышёва легко программно реализовать.

Поэтому вместо полиномиального разложения в (15) могут стоять и другие параметрические модели. Для применения нашего формализма необходимо лишь уметь вычислять их производные по пространственным координатам и по вектору параметров $\vec{c}$ (в частности, смешанные производные вроде $\frac{\partial}{\partial c_i} \frac{\partial v}{\partial x}$).

3. ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

3.1. Выбор численных алгоритмов

В рамках нашей работы можно выделить три основные вычислительные задачи:

1. представление априорной скоростной модели $v_0(x, z)$,
2. лучевое трассирование и решение системы возмущений луча,
3. обновление параметров модели в направлении антиградиента.

Для их решения мы пользовались библиотеками NumPy [10] и SciPy [11] языка программирования Python. Для визуализации результатов мы пользовались библиотекой Matplotlib [12].

Априорная скоростная модель задавалась на прямоугольной сетке с шагом 25 м с последующей бикубической интерполяцией [13]. Для решения систем ОДУ (4) и (10) на стадии лучевого трассирования и трассирования возмущений луча мы использовали метод Рунге—Кутты четвёртого порядка с постоянным шагом [14]. Для реализации градиентного спуска мы воспользовались специализированной функцией из библиотеки SciPy. Среди доступных ей методов оптимизации мы выбрали метод “BFGS” [15].

3.2. Выбор моделей, системы наблюдений и начальных приближений

При тестировании нашего метода мы ограничились синтетическими данными с известными истинными распределениями скоростей. Для их расчёта мы воспользовались самостоятельно реализованным двухточечным лучевым трассированием [16, 17]. Мы рассмотрели две модели: одну с гладкой аномалией и единственной отражающей границей, а другую — разделённую тремя границами на контрастные однородные слои:

$$v_I(x, z) = 2000 + 1000e^{-\left(\frac{x}{500}\right)^2 - \left(\frac{z-600}{500}\right)^2} \text{ [м/с]},$$

$$v_{II}(x, z) = \begin{cases} 2000, & z \leq 400, \\ 1500, & 400 < z \leq 800, \\ 2500, & 800 < z \leq 1200, \\ 2000, & 1200 < z, \end{cases} \text{ [м/с]}.$$

Обе скоростные модели изображены в верхних частях рис. 2 и 3. Отметим, что граница в первой модели — фиктивная — и была помещена на глубину 1200 м. Вторая модель явно разбита на четыре слоя с плоскими горизонтальными границами на глубинах 400, 800 и 1200 м.

В обеих моделях мы использовали одинаковые системы наблюдений. Источники были расставлены в координатах от -750 до 750 м с шагом 50 м, а приёмники расставлялись с тем же шагом в диапазоне полутора километров по обе стороны от каждого источника. В качестве начальных приближений $v_0(x, z)$ мы использовали модели предельных эффективных скоростей, посчитанные по формулам из [1]; априорные значения коэффициентов разложения (15) были взяты нулевыми. Начальные приближения изображены в нижних частях рис. 2 и 3. Кроме самих моделей и положений границ на этих рисунках изображены облака средних точек — приблизительных положений точек отражения, рассчитанных в начальных скоростных моделях (см. формулу (8) и замечание в первом разделе). Видно, что в первой модели форма границы искажена, а во второй модели одна из границ размыта и смещена по глубине. Кроме того, на отдельные цветовые шкалы вынесены абсолютные значения расстояний $h_k(v_0)$ (6), из которых ясно, что в обеих моделях есть существенно не сходящиеся в нулевом времени лучи.

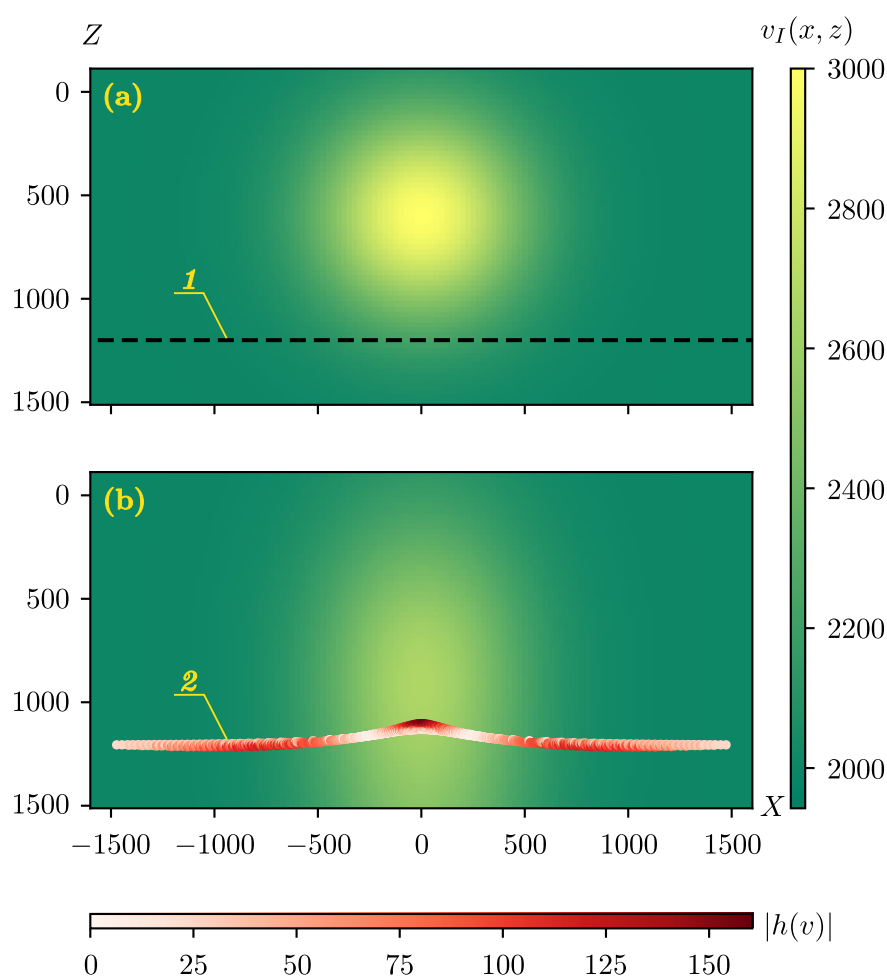


Рис. 2. (а) модель $v_I(x, z)$ [м/с], Z [м], X [м] и (б) начальное приближение ($|h(v)|$ [м] — расхождение источника и приёмника). 1 — истинное положение границы, 2 — облако средних точек, приблизительные положения точек отражения

3.3. Результаты численных экспериментов

Точность восстановления скоростной модели во многом зависит от удачного выбора параметризации (15): слишком низкие степени разложения не позволяют хорошо представить искомые аномалии, а высокие приводят к переобучению — скоростная модель подстраивается под отдельные лучи, и единая структура не вырисовывается, несмотря на низкие значения невязки. Нам не удалось выработать каких-то рекомендаций по оптимальному выбору сложности полиномиального разложения, и поэтому мы ограничились эмпирическим поиском.

Модели $v_I(x, z)$ и $v_{II}(x, z)$ отличаются по латеральной и глубинной изменчивости. Непрерывная модель $v_I(x, z)$ симметрична относительно центра аномалии, и для её представления естественно взять равное число членов разложения по горизонтали и вертикали с поправкой на соотношение сторон модели. С другой стороны, горизонтально-слоистая модель $v_{II}(x, z)$ совсем не изменяется по горизонтали, но включает три точки разрыва в вертикальном направлении, поэтому логично взять высокую степень разложения по оси z и низкую — по оси x . Кроме того, для наглядности эксперимента хотелось исследовать модели одинаковой сложности. В процессе поиска мы остановились на следующих параметрах:

- в модели $v_I(x, z)$: 26 членов разложения по горизонтали и 9 по вертикали,

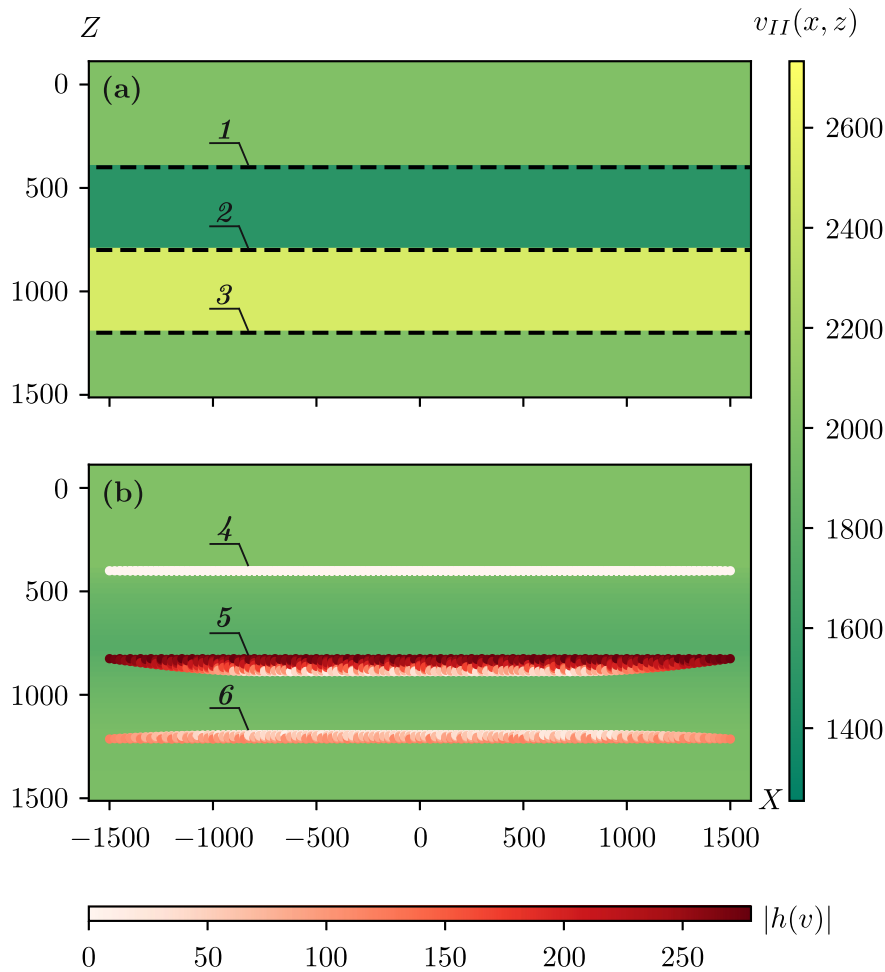


Рис. 3. (а) модель $v_{II}(x, z)$ [м/с], Z [м], X [м] и (б) начальное приближение ($|h(v)|$ [м] — расхождение источника и приёмника). 1, 2, 3 — истинные положения границ, 4, 5, 6 — облака средних точек, приблизительные положения точек отражения

- в модели $v_{II}(x, z)$: 9 членов разложения по горизонтали и 26 по вертикали.

Мы минимизировали функционал (7) до тех пор, пока невязка не становилась меньше 0.1 м^2 , что соответствовало максимальным значениям $h_k(v)$ на уровне 1 м. Это условный выбор, но мы считаем его оправданным: характерные длины волн в сейсморазведке составляют десятки метров, и дальнейшая оптимизация в более реалистичных условиях не будет добавлять информации об истинном строении среды, а только подстроит модель под ошибки в данных. Результаты оптимизации представлены на рис. 4 и 5 в нижних частях рисунков; в верхних частях для сравнения изображены истинные скоростные модели. Аналогично рис. 2 и 3, на дополнительных цветовых шкалах изображены расстояния между источниками и приёмниками в нулевом времени отражения. Видно, что в обоих случаях были восстановлены форма и глубина границ, но в первой модели восстановленная аномалия скорости растянута по вертикали, а её амплитуда занижена. В то же время, во второй модели удалось восстановить три контрастных слоя, не изменив их мощности и довольно точно восстановив скорости. Мы связываем это с большим объёмом входных данных, включающим отражения с разных глубин. Локальные экстремумы внутри однородных слоёв можно объяснить неравномерной сходимостью полиномиальных рядов к разрывным функциям.

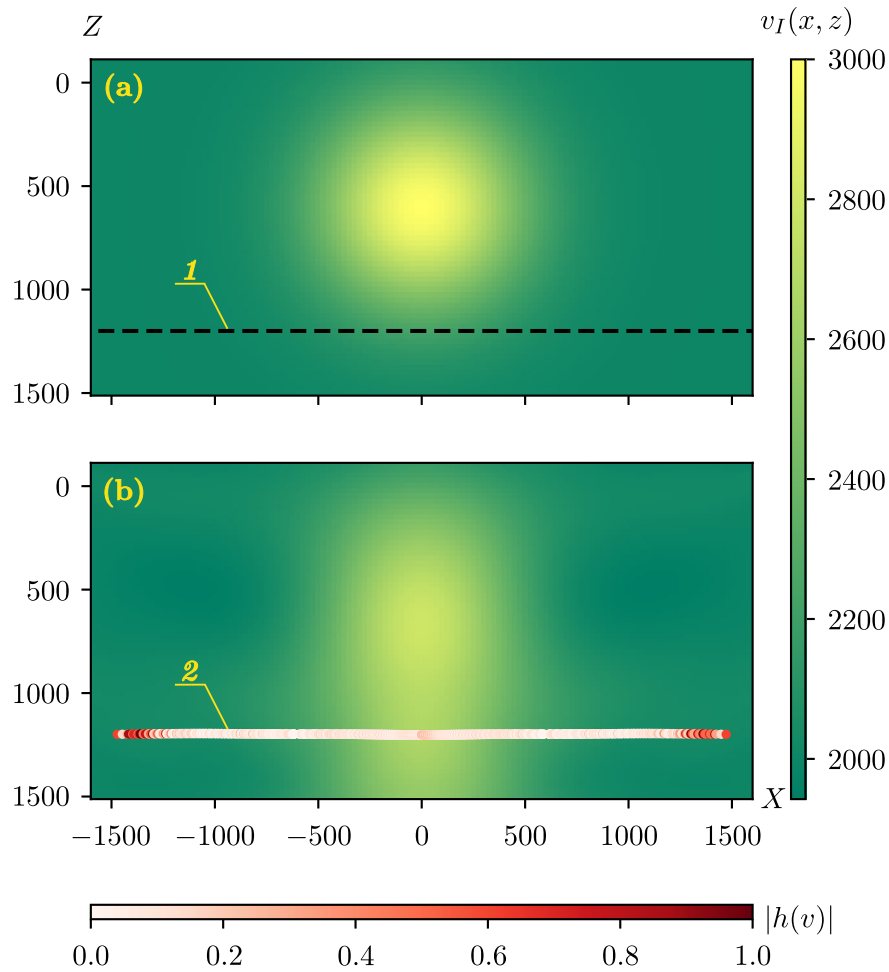


Рис. 4. (а) модель $v_I(x, z)$ [м/с], Z [м], X [м] и (б) результат оптимизации ($|h(v)|$ [м] — расхождение источника и приёмника). 1 — истинное положение границы, 2 — положение границы, восстановленное по лучам уравнения двойного корня

3.4. Поведение функционала невязки в окрестности решения

Для прикладной оценки единственности полученных решений мы исследовали поведение целевого функционала (7) в их окрестности. Используя конечно-разностные формулы, мы оценили матрицы вторых производных невязки в точках минимума, нашли их собственные числа и векторы. Затем мы построили срезы целевого функционала в трёх координатных осях Q_1 , Q_2 и Q_3 , задаваемых собственными векторами, соответствующими наибольшим собственным числам. Вдоль этих направлений можно ожидать самый быстрый рост функционала невязки вблизи точки минимума.

Срезы функционала невязки приведены на рис. 6. В левом столбце приведены срезы для первой модели, в правом — для второй. Вдоль осей отложены амплитуды смещений от найденных решений вдоль соответствующих собственных векторов. Незаполненные области в правом столбце означают, что во многих пробных скоростных моделях какие-то лучи становились горизонтальными, и функционал невязки был не определён. Тем не менее, видно, что в трёх выбранных направлениях наблюдается быстрый рост невязки без локальных минимумов и ярко выраженной овражности. При этом следует помнить, что числа обусловленности матриц вторых производных оказались на уровне 10^{13} , и помимо выделенных главных направлений

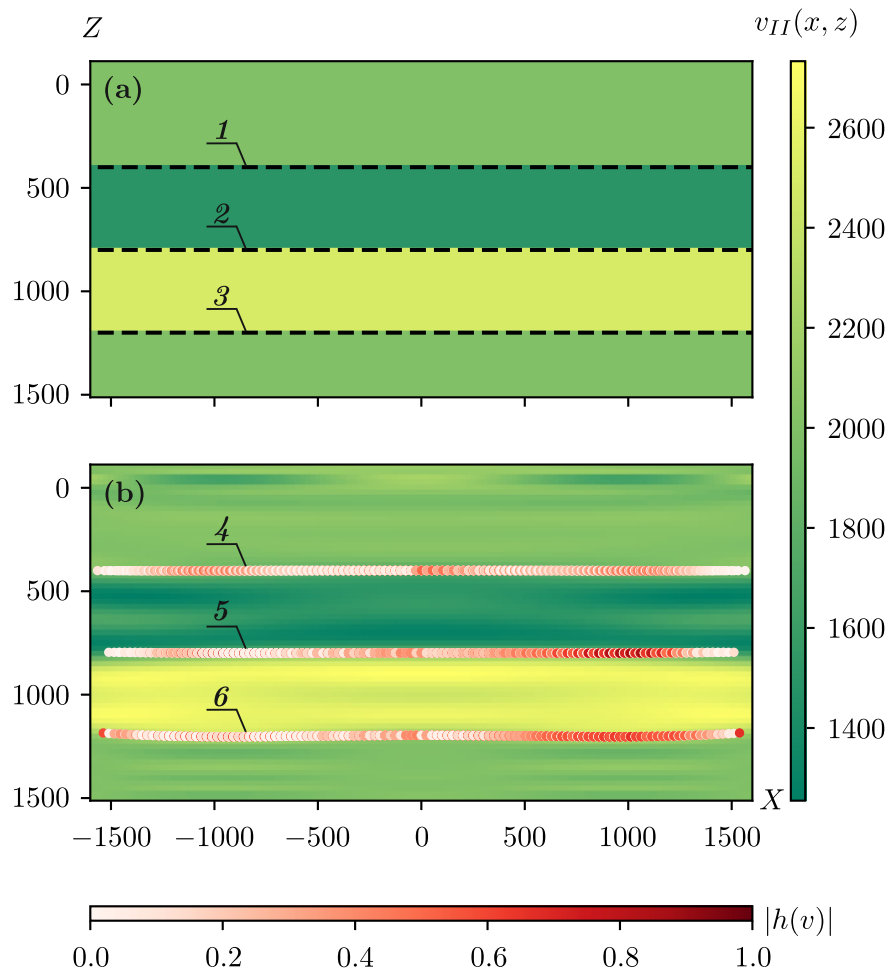


Рис. 5. (а) модель $v_{II}(x, z)$ [м/с], Z [м], X [м] и (б) результат оптимизации ($|h(v)|$ [м] — расхождение источника и приёмника). 1, 2, 3 — истинные положения границ, 4, 5, 6 — положения границ, восстановленные по лучам уравнения двойного корня

в пространстве моделей (в нашем случае 234-мерном) есть и другие, вдоль которых целевой функционал фактически не меняется, и при наличии шума в данных решение может быть неоднозначным.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Представленный в данной работе метод принимает на вход координаты источников и приёмников, времена пробега однократно-отражённых волн и их производные, позволяя одновременно восстанавливать гладкую скоростную модель и положения точек отражения. Среди известных авторам методов скоростного анализа он больше всего похож на стереотомографию [18]. Новизна предложенного подхода заключается в следующем:

- мы используем характеристическое уравнение двойного корня (1), а не классическое уравнение эйконала [16, 17],
- мы используем “физический” критерий оптимизации (падающий и отражённый лучи сходятся в точке отражения), а не критерий удовлетворения данным.

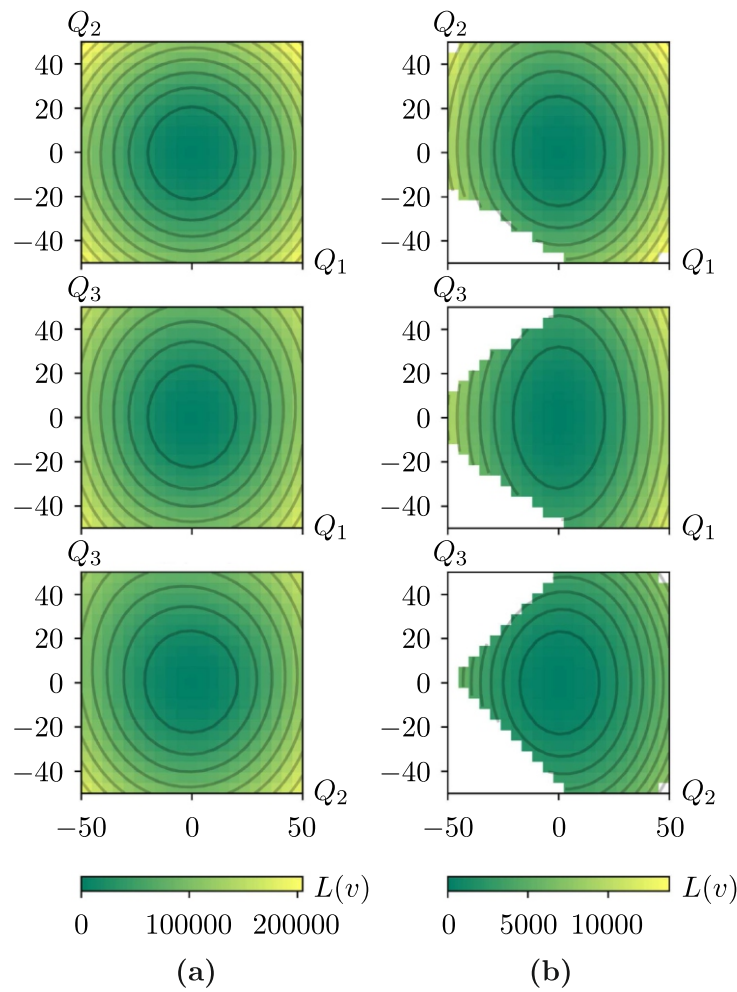


Рис. 6. Срезы функционала невязки $L(v)[\text{м}^2]$, $Q_1[\text{м/с}]$, $Q_2[\text{м/с}]$, $Q_3[\text{м/с}]$ в окрестности найденных решений (а) модели 1 и (б) модели 2. Незаполненные области означают, что в соответствующих моделях лучи становились горизонтальными, и функционал невязки не был определён

Главным преимуществом нашего метода является меньшее число неизвестных: в стереотомографии, кроме параметров скоростной модели, подбираются точки отражения, углы отражения и углы падения границ. В нашем подходе особая форма уравнения эйконала позволяет трассировать лучи в обратном времени и однозначно устанавливать момент отражения, а выбранный принцип оптимизации включает только параметры скоростной модели. Координаты точек отражения могут быть оценены после оптимизации скоростной модели по формуле (8), а углы отражения волн и углы падения границ легко находятся из траекторий лучей уравнения двойного корня [9].

Основным недостатком представленного подхода является ограничение на нигде-негоризонтальное распространение волн, что не позволяет восстанавливать круто падающие участки отражающих границ и высокоамплитудные аномалии скоростных моделей.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В нашей работе мы представили метод скоростного анализа, основанный на одновременной инверсии данных о временах пробега отражённых волн и об их производных по координатам источников и приёмников. В основе предложенного метода лежит развитая нами

высокочастотная асимптотика уравнения двойного корня — особой аппроксимации волнового уравнения, описывающей однократно-отражённые волны в пространстве данных. В работе сформулирована обратная задача и построен целевой функционал, который мы минимизируем градиентным методом в некотором классе параметрических скоростных моделей. Уравнения, позволяющие вычислить градиент целевого функционала, выведены в тексте статьи. Главным преимуществом предложенного подхода является меньшее, по сравнению с ближайшим известным нам аналогом, количество оптимизируемых параметров, а главным недостатком — ограничение на сложность восстанавливаемой модели. Алгоритм протестирован на двух наборах синтетических данных. Все построения производились в двумерной постановке задачи.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Уравнения в тексте статьи часто включали производные гамильтониана (2). В этом приложении будут даны явные формулы для их вычисления. При их записи мы будем учитывать, что все производные вычисляются на луче, на котором сам гамильтониан равен нулю.

Введём некоторые обозначения:

$$S_m = \frac{1}{v_s^2} - mp_s^2, \quad R_m = \frac{1}{v_r^2} - mp_r^2, \quad m = \overline{1, 3}.$$

Перепишем множители (3), составляющие гамильтониан (2):

$$C_\tau(\vec{x}, \vec{p}) = \frac{1}{\frac{1}{v_s^2 \sqrt{S_1}} + \frac{1}{v_r^2 \sqrt{R_1}}}, \quad H_0(\vec{x}, \vec{p}) = -\left(p_z + \sqrt{S_1} + \sqrt{R_1}\right).$$

Выпишем их первые производные:

$$\nabla_{\vec{x}} C_\tau = C_\tau^2 \begin{pmatrix} \frac{S_2}{v_s^3 S_1^{3/2}} \frac{\partial v_s}{\partial x_s}, \\ \frac{R_2}{v_r^3 R_1^{3/2}} \frac{\partial v_r}{\partial x_r}, \\ \frac{S_2}{v_s^3 S_1^{3/2}} \frac{\partial v_s}{\partial z} + \frac{R_2}{v_r^3 R_1^{3/2}} \frac{\partial v_r}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad \nabla_{\vec{p}} C_\tau = -C_\tau^2 \begin{pmatrix} \frac{p_s}{v_s^2 S_1^{3/2}}, \\ \frac{p_r}{v_r^2 R_1^{3/2}}, \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$\nabla_{\vec{x}} H_0 = \begin{pmatrix} \frac{1}{v_s^3 S_1^{1/2}} \frac{\partial v_s}{\partial x_s}, \\ \frac{1}{v_r^3 R_1^{1/2}} \frac{\partial v_r}{\partial x_r}, \\ \frac{1}{v_s^3 S_1^{1/2}} \frac{\partial v_s}{\partial z} + \frac{1}{v_r^3 R_1^{1/2}} \frac{\partial v_r}{\partial z} \end{pmatrix}, \quad \nabla_{\vec{p}} H_0 = \begin{pmatrix} \frac{p_s}{S_1^{1/2}}, \\ \frac{p_r}{R_1^{1/2}}, \\ -1 \end{pmatrix},$$

$$\frac{\partial C_\tau}{\partial v_s} = C_\tau^2 \frac{S_2}{v_s^3 S_1^{3/2}}, \quad \frac{\partial C_\tau}{\partial v_r} = C_\tau^2 \frac{R_2}{v_r^3 R_1^{3/2}}, \quad \frac{\partial H_0}{\partial v_s} = \frac{1}{v_s^3 S_1^{1/2}}, \quad \frac{\partial H_0}{\partial v_r} = \frac{1}{v_r^3 R_1^{1/2}}.$$

Т. к. на лучах $H_0 \equiv 0$, вычисление вторых производных C_τ необязательно: они будут появляться исключительно в произведениях с H_0 . Выпишем матрицы вторых производных последнего:

$$\begin{aligned} \nabla_{\vec{x}} \nabla_{\vec{x}} H_0 &= \begin{pmatrix} \frac{1}{v_s^3 S_1^{1/2}} \frac{\partial^2 v_s}{\partial x_s^2} & 0 & \frac{1}{v_s^3 S_1^{1/2}} \frac{\partial^2 v_s}{\partial x_s \partial z} \\ 0 & \frac{1}{v_r^3 R_1^{1/2}} \frac{\partial^2 v_r}{\partial x_r^2} & \frac{1}{v_r^3 R_1^{1/2}} \frac{\partial^2 v_r}{\partial x_r \partial z} \\ \frac{1}{v_s^3 S_1^{1/2}} \frac{\partial^2 v_s}{\partial x_s \partial z} & \frac{1}{v_r^3 R_1^{1/2}} \frac{\partial^2 v_r}{\partial x_r \partial z} & \frac{1}{v_s^3 S_1^{1/2}} \frac{\partial^2 v_s}{\partial z^2} + \frac{1}{v_r^3 R_1^{1/2}} \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} \end{pmatrix} - \\ &\begin{pmatrix} \left(\frac{\partial v_s}{\partial x_s} \right)^2 \frac{1}{v_s^4 S_1^{3/2}} \left(\frac{1}{v_s^2} + S_3 \right) & 0 & \frac{\partial v_s}{\partial x_s} \frac{\partial v_s}{\partial z} \frac{1}{v_s^4 S_1^{3/2}} \left(\frac{1}{v_s^2} + S_3 \right) \\ 0 & \left(\frac{\partial v_r}{\partial x_r} \right)^2 \frac{1}{v_r^4 R_1^{3/2}} \left(\frac{1}{v_r^2} + R_3 \right) & \frac{\partial v_r}{\partial x_r} \frac{\partial v_r}{\partial z} \frac{1}{v_r^4 R_1^{3/2}} \left(\frac{1}{v_r^2} + R_3 \right) \\ \frac{\partial v_s}{\partial x_s} \frac{\partial v_s}{\partial z} \frac{1}{v_s^4 S_1^{3/2}} \left(\frac{1}{v_s^2} + S_3 \right) & \frac{\partial v_r}{\partial x_r} \frac{\partial v_r}{\partial z} \frac{1}{v_r^4 R_1^{3/2}} \left(\frac{1}{v_r^2} + R_3 \right) & \left(\frac{\partial v_s}{\partial z} \right)^2 \frac{1}{v_s^4 S_1^{3/2}} \left(\frac{1}{v_s^2} + S_3 \right) + \left(\frac{\partial v_r}{\partial z} \right)^2 \frac{1}{v_r^4 R_1^{3/2}} \left(\frac{1}{v_r^2} + R_3 \right) \end{pmatrix}, \\ \nabla_{\vec{p}} \nabla_{\vec{p}} H_0 &= \begin{pmatrix} \frac{1}{v_s^2 S_1^{3/2}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{v_r^2 R_1^{3/2}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \nabla_{\vec{x}} \nabla_{\vec{p}} H_0 = \nabla_{\vec{p}} \nabla_{\vec{x}}^T H_0 = \begin{pmatrix} \frac{p_s}{v_s^3 S_1^{3/2}} \frac{\partial v_s}{\partial x_s} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{p_r}{v_r^3 R_1^{3/2}} \frac{\partial v_r}{\partial x_r} & 0 \\ \frac{p_s}{v_s^3 S_1^{3/2}} \frac{\partial v_s}{\partial z} & \frac{p_r}{v_r^3 R_1^{3/2}} \frac{\partial v_r}{\partial z} & 0 \end{pmatrix}, \\ \nabla_{\vec{x}} \frac{\partial H_0}{\partial v_s} &= - \begin{pmatrix} \frac{\partial v_s}{\partial x_s} \frac{1}{v_s^4 S_1^{3/2}} \left(\frac{1}{v_s^2} + S_3 \right) \\ 0 \\ \frac{\partial v_s}{\partial z} \frac{1}{v_s^4 S_1^{3/2}} \left(\frac{1}{v_s^2} + S_3 \right) \end{pmatrix}, \quad \nabla_{\vec{x}} \frac{\partial H_0}{\partial v_r} = - \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{\partial v_r}{\partial x_r} \frac{1}{v_r^4 R_1^{3/2}} \left(\frac{1}{v_r^2} + R_3 \right) \\ \frac{\partial v_r}{\partial z} \frac{1}{v_r^4 R_1^{3/2}} \left(\frac{1}{v_r^2} + R_3 \right) \end{pmatrix}, \\ \nabla_{\vec{p}} \frac{\partial H_0}{\partial v_s} &= \begin{pmatrix} \frac{p_s}{v_s^3 S_1^{3/2}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \nabla_{\vec{p}} \frac{\partial H_0}{\partial v_r} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{p_r}{v_r^3 R_1^{3/2}} \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Наконец, выразим производные гамильтониана (2) на луче:

$$\begin{aligned} \nabla_{\vec{x}} H &= C_\tau \nabla_{\vec{x}} H_0, \quad \nabla_{\vec{p}} H = C_\tau \nabla_{\vec{p}} H_0, \\ \nabla_{\vec{x}} \nabla_{\vec{x}} H &= C_\tau \nabla_{\vec{x}} \nabla_{\vec{x}} H_0 + \nabla_{\vec{x}} C_\tau \otimes \nabla_{\vec{x}} H_0 + \nabla_{\vec{x}} H_0 \otimes \nabla_{\vec{x}} C_\tau, \\ \nabla_{\vec{p}} \nabla_{\vec{p}} H &= C_\tau \nabla_{\vec{p}} \nabla_{\vec{p}} H_0 + \nabla_{\vec{p}} C_\tau \otimes \nabla_{\vec{p}} H_0 + \nabla_{\vec{p}} H_0 \otimes \nabla_{\vec{p}} C_\tau, \\ \nabla_{\vec{x}} \nabla_{\vec{p}} H &= \nabla_{\vec{p}} \nabla_{\vec{x}}^T H = C_\tau \nabla_{\vec{x}} \nabla_{\vec{p}} H_0 + \nabla_{\vec{x}} C_\tau \otimes \nabla_{\vec{p}} H_0 + \nabla_{\vec{x}} H_0 \otimes \nabla_{\vec{p}} C_\tau, \\ \nabla_{\vec{x}} \frac{\partial H}{\partial v_s} &= C_\tau \nabla_{\vec{x}} \frac{\partial H_0}{\partial v_s} + \frac{\partial H_0}{\partial v_s} \nabla_{\vec{x}} C_\tau + \frac{\partial C_\tau}{\partial v_s} \nabla_{\vec{x}} H_0, \quad \nabla_{\vec{x}} \frac{\partial H}{\partial v_r} = C_\tau \nabla_{\vec{x}} \frac{\partial H_0}{\partial v_r} + \frac{\partial H_0}{\partial v_r} \nabla_{\vec{x}} C_\tau + \frac{\partial C_\tau}{\partial v_r} \nabla_{\vec{x}} H_0, \end{aligned}$$

$$\nabla_{\vec{p}} \frac{\partial H}{\partial v_s} = C_\tau \nabla_{\vec{p}} \frac{\partial H_0}{\partial v_s} + \frac{\partial H_0}{\partial v_s} \nabla_{\vec{p}} C_\tau + \frac{\partial C_\tau}{\partial v_s} \nabla_{\vec{p}} H_0, \quad \nabla_{\vec{p}} \frac{\partial H}{\partial v_r} = C_\tau \nabla_{\vec{p}} \frac{\partial H_0}{\partial v_r} + \frac{\partial H_0}{\partial v_r} \nabla_{\vec{p}} C_\tau + \frac{\partial C_\tau}{\partial v_r} \nabla_{\vec{p}} H_0.$$

Здесь знаком $\otimes$ обозначено внешнее произведение векторов. Если $\vec{a} = (a_1, a_2, \dots, a_M)^T$ и $\vec{b} = (b_1, b_2, \dots, b_N)^T$, оно вычисляется следующим образом:

$$\vec{a} \otimes \vec{b} = \begin{pmatrix} a_1 b_1 & a_1 b_2 & \cdots & a_1 b_N \\ a_2 b_1 & a_2 b_2 & \cdots & a_2 b_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_M b_1 & a_M b_2 & \cdots & a_M b_N \end{pmatrix}.$$

Все формулы были проверены в системе символьной математики Wolfram Mathematica 13.2 [19].

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследования проводились в рамках государственных заданий FSUS-2022-0019 и FWZZ-2022-0017. Других источников финансирования проведения или руководства данным конкретным исследованием не было.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Гурвич И. И., Боганик Г. Н. Сейсморазведка: Учебник для вузов. Тверь: АИС, 2006.
2. Bleistein N., Cohen J. K., Stockwell W. Jr. Mathematics of Multidimensional Seismic Imaging, Migration, and Inversion. N. Y.: Springer, 2001; DOI: 10.1007/978-1-4613-0001-4
3. Lo T., Inderwiesen P. L. Fundamentals of Seismic Tomography. Tulsa: SEG Books, 1994; DOI: 10.1190/1.9781560802334
4. Claerbout J. F. Imaging the earth's interior. Oxford: Blackwell scientific publication, 1985.
5. Sava P. C., Fomel S. Angle-domain common-image gathers by wavefield continuation methods // Geophysics. 2003. V. 68, N 3. P. 1065–1074; DOI: 10.1190/1.1581078
6. Zhang Y., Xu S., Bleistein N., Zhang G. True-amplitude, angle-domain, common-image gathers from one-way wave-equation migrations // Geophysics. 2007. V. 72, N 1. P. S49–S58; DOI: 10.1190/1.2399371
7. Белоносова А. В., Алексеев А. С. Об одной постановке обратной кинематической задачи сейсмоки для двумерной неоднородной среды // Некоторые методы и алгоритмы интерпретации геофизических данных. 1967. С. 137–154.
8. Duchkov A. A., de Hoop M. V. Extended isochron rays in prestack depth migration // Geophysics. 2010. V. 75, N 4. P. S139–S150; DOI: 10.1190/1.3459955
9. Шилов Н. Н. Система динамического лучевого трассирования для уравнения двойного корня. Выпускная квалификационная работа магистра. Новосибирск: ММФ НГУ, 2021.
10. Harris C. R., Millman K. J., van der Walt S. J., Gommers R., Virtanen P., Cournapeau D., Wieser E., Taylor J., Berg S., Smith N. J., Kern R., Picus M., Hoyer S., van Kerkwijk M. H., Brett M., Haldane A., del Rio J. F., Wiebe M., Peterson P., Gérard-Marchant P., Sheppard K., Reddy T., Weckesser W., Abbasi H., Gohlke Ch., Oliphant T. E. Array programming with NumPy // Nature. 2020. V. 585, N 7825. P. 357–362; DOI: 10.1038/s41586-020-2649-2
11. Virtanen P., Gommers R., Oliphant T. E., Haberland M., Reddy T., Cournapeau D., Burovski E., Peterson P., Weckesser W., Bright J., van der Walt S. J., Brett M., Wilson J., Millman K. J., Mayorov N., Nelson A. R. J., Jones E., Kern R., Larson E., Carey C. J., Polat I., Feng Y., Moore E. W., VanderPlas J., Laxalde D., Perktold J., Cimrman R., Henriksen I., Quintero E. A., Harris Ch. R., Archibald A. M., Ribeiro A. H., Pedregosa F., van Mulbregt P., SciPy 1.0 Contributors SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python // Nat. Methods. 2020. V. 17, N 3. P. 261–272; DOI: 10.1038/s41592-019-0686-2

12. *Hunter J. D.* Matplotlib: A 2D graphics environment // *Comput. Sci. Eng.* 2007. V. 9, N 3. P. 90–95; DOI: 10.1109/MCSE.2007.55
13. *Марчук Г. И.* Методы вычислительной математики. М: Наука, 1980.
14. *Ильин В. П.* Методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений. Новосибирск: ИПЦ НГУ, 2017.
15. *Nocedal J., Wright S. J.* Numerical Optimization. Second Edition. N. Y.: Springer, 2006.
16. *Červený V.* Seismic ray theory. Cambridge: Cambridge university press, 2001.
17. *Алексеев А. С., Бабич В. М., Гельчинский Б. Я.* Лучевой метод вычисления интенсивности волновых фронтов // *Вопросы динамической теории распространения сейсмических волн.* 1961. Т. 5. С. 3–24.
18. *Gilles L.* Stereotomography // *Geophysics.* 2008. V. 73, N 5. P. VE25-VE34; DOI: 10.1190/1.2952039
19. *Wolfram Research, Inc.* Mathematica, Version 13.2. Champaign, IL, 2022.

UDC 532.517.4

MIGRATION VELOCITY ANALYSIS USING A RAY METHOD ASYMPTOTICS OF THE DOUBLE SQUARE ROOT EQUATION

© 2024 N. N. Shilov^{1a}, A. A. Duchkov^{2b}¹*Novosibirsk State University, Novosibirsk, 630090 Russia,*²*Trofimuk Institute of Petroleum Geology and Geophysics, Siberian Branch,
Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, 630090 Russia*E-mails: ^an.shilov@g.nsu.ru, ^bDuchkovAA@ipgg.sbras.ru

Received 17.04.2023, revised 02.05.2023, accepted 07.06.2023

Abstract. Seismic images of subsurface structures are the most valuable outcome of seismic data processing. The image quality is strongly affected by the accuracy of background velocity model. In this paper, we develop a gradient-descent velocity update algorithm based on our original high-frequency asymptotics of the double square root equation, i. e., a special one-way approximation of the wave equation describing single-scattered wave field only. We propose a loss function consistent with widely adopted imaging condition and derive equations for its gradient computation. We test our method on noise-free synthetic datasets in 2D settings.

Keywords: seismic inverse problem, velocity analysis, double square root equation, ray method, perturbation theory.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2024.27.108

REFERENCES

1. I. I. Gurvich and G. N. Boganik, *Seismic Exploration: A Textbook for Universities* (AIS, Tver, 2006) [in Russian].
2. N. Bleistein, J. K. Cohen, and W. Stockwell, Jr., *Mathematics of Multidimensional Seismic Imaging, Migration, and Inversion* (Springer, New York, 2001). <https://doi.org/10.1007/978-1-4613-0001-4>
3. T. Lo and P. L. Inderwiesen, *Fundamentals of Seismic Tomography* (SEG Books, Tulsa, 1994). <https://doi.org/10.1190/1.9781560802334>
4. J. F. Claerbout, *Imaging the Earth's Interior* (Blackwell, Oxford, 1985).
5. P. C. Sava and S. Fomel, “Angle-domain common-image gathers by wavefield continuation methods,” *Geophysics* **68** (3), 1065–1074 (2003). <https://doi.org/10.1190/1.1581078>
6. Y. Zhang, S. Xu, N. Bleistein, and G. Zhang, “True-amplitude, angle-domain, common-image gathers from one-way wave-equation migrations,” *Geophysics* **72** (1), S49–S58 (2007). <https://doi.org/10.1190/1.2399371>
7. A. V. Belonosova and A. S. Alekseev, “On one formulation of the inverse kinematic seismic problem for a two-dimensional inhomogeneous medium,” in *Some Methods and Algorithms for Interpreting Geophysical Data* (Nauka, Moscow, 1967), 137–154 [in Russian].
8. A. A. Duchkov and M. V. de Hoop, “Extended isochron rays in prestack depth migration,” *Geophysics* **75** (4), S139–S150 (2010). <https://doi.org/10.1190/1.3459955>
9. N. N. Shilov, “Dynamic ray tracing system for the double square root equation,” *Master's Final Qualifying Thesis* (MMF NGU, Novosibirsk, 2021) [in Russian].

10. C. R. Harris, K. J. Millman, S. J. van der Walt, R. Gommers, P. Virtanen, D. Cournapeau, E. Wieser, J. Taylor, S. Berg, N. J. Smith, R. Kern, M. Picus, S. Hoyer, M. H. van Kerkwijk, M. Brett, A. Haldane, J. F. del Rio, M. Wiebe, P. Peterson, P. G'érard-Marchant, K. Sheppard, T. Reddy, W. Weckesser, H. Abbasi, Ch. Gohlke, and T. E. Oliphant, "Array programming with NumPy," *Nature* **585** (7825), 357–362 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41586-020-2649-2>
11. P. Virtanen, R. Gommers, T. E. Oliphant, M. Haberland, T. Reddy, D. Cournapeau, E. Burovski, P. Peterson, W. Weckesser, J. Bright, S. J. van der Walt, M. Brett, J. Wilson, K. J. Millman, N. Mayorov, A. R. J. Nelson, E. Jones, R. Kern, E. Larson, C. J. Carey, I. Polat, Y. Feng, E. W. Moore, J. VanderPlas, D. Laxalde, J. Perktold, R. Cimrman, I. Henriksen, E. A. Quintero, Ch. R. Harris, A. M. Archibald, A. H. Ribeiro, F. Pedregosa, P. van Mulbregt, and SciPy 1.0 Contributors, "SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python," *Nature Methods* **17** (3), 261–272 (2020). <https://doi.org/10.1038/s41592-019-0686-2>
12. J. D. Hunter, "Matplotlib: A 2D graphics environment," *Comput. Sci. Eng.* **9** (3), 90–95 (2007). <https://doi.org/10.1109/MCSE.2007.55>
13. G. I. Marchuk, *Methods of Computational Mathematics* (Nauka, Moscow, 1980) [in Russian].
14. V. P. Il'in, *Methods for Solving Ordinary Differential Equations* (IPTs NGU, Novosibirsk, 2017) [in Russian].
15. J. Nocedal and S. J. Wright, *Numerical Optimization* (Springer, New York, 2006).
16. V. Červený, *Seismic Ray Theory* (Cambridge Univ. Press, Cambridge, 2001).
17. A. S. Alekseev, V. M. Babich, and B. Ya. Gelchinskii, "Ray method for calculating the intensity of wave fronts," in *Questions of the Dynamic Theory of Seismic Wave Propagation* (1961), **5**, 3–24 [in Russian].
18. L. Gilles, "Stereotomography," *Geophysics* **73** (5), VE25–VE34 (2008). <https://doi.org/10.1190/1.2952039>
19. Wolfram Research, Inc., *Mathematica. Version 13.2* (Champaign, IL, 2022).

СИБИРСКИЙ ЖУРНАЛ
ИНДУСТРИАЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ

2024. Том 27, № 1

Зав. редакцией Т. А. Звонарева

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору
в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.
Свидетельство о регистрации ЭЛ № ФС77-86274 от 02.11.2023 г.
Размещение в сети Интернет: math-szim.ru.

Дата размещения в сети Интернет 22.04.2024 г.
Формат $60 \times 84^{1/8}$. Усл. печ. л. 14,8.
Объем 11,6 МБ.

Издательство Института математики,
пр. Академика Коптюга, 4, Новосибирск 630090, Россия