

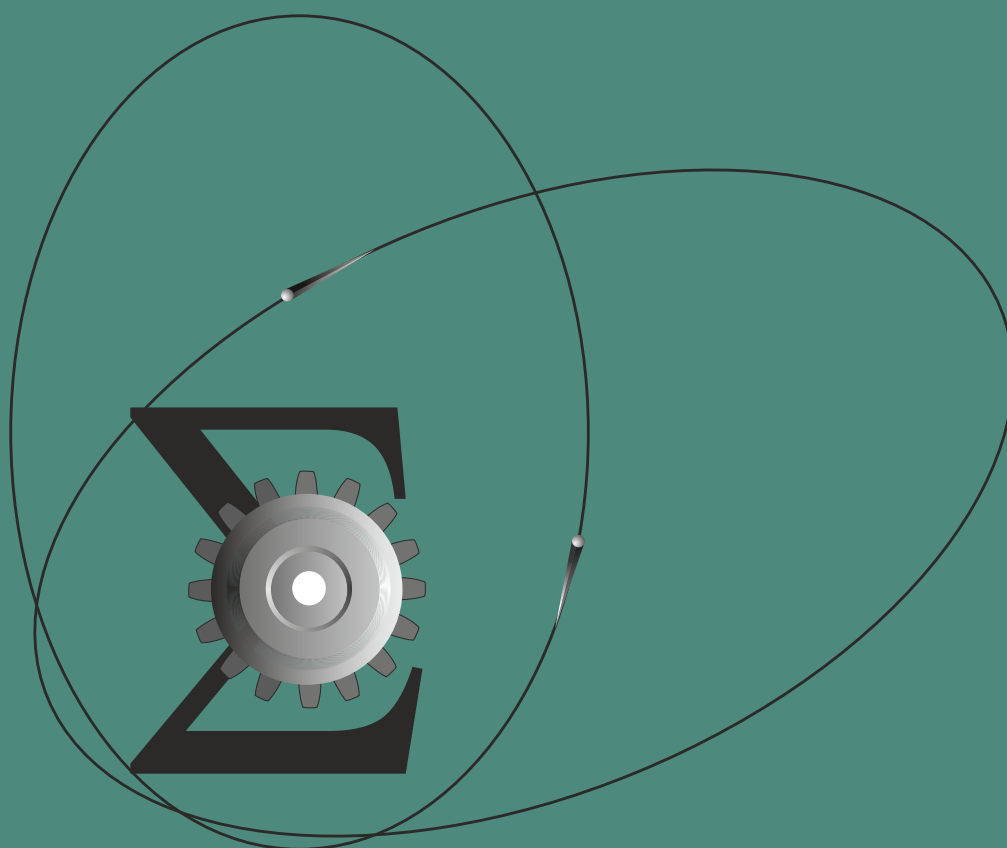
ISSN 2949-6284

СИБИРСКИЙ ЖУРНАЛ ИНДУСТРИАЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ

ТОМ 28

№ 3

2025



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
В. А. Левин	В. В. Шайдуров
Н. И. Макаренко	А. А. Шананин

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 28, № 3(103)

Научный журнал

Июль–сентябрь, 2025 г.

СОДЕРЖАНИЕ

Абдукаримов Ф. А. Обобщённая разрешимость задачи Неймана для глобального по времени параболического уравнения.....	5
Антипина Е. В., Мустафина С. А., Антипин А. Ф. О приближённом решении нелинейной задачи оптимального быстрогодействия	20
Гималтдинов И. К., Родионов А. С., Гизатуллин Р. Ф., Кочанова Е. Ю. Влияние экранирования насыпной среды на динамику ударно-волнового импульса.....	36
Голых Р. Н., Карра Ж.-Б. Модель формирования коротких капиллярных волн на границе «жидкость–газ» при воздействии импульсных ударных возмущений в ходе ультразвуковой кавитации	51
Дашевский Ю. А., Суродина И. В., Ельцов И. Н. Теоретический анализ и численное моделирование сигналов кондуктометрического датчика для оценивания минерализации попутной жидкости в газожидкостном потоке	70
Сактоева К. П., Лаевский Ю. М. Библиотека программ CCODE для решения жёстких систем обыкновенных дифференциальных уравнений	82
Филимонов С. А., Минаков А. В. Развитие поросетевого подхода для моделирования переноса модифицирующих добавок в процессе нефтewытеснения	104

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
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. 28, No. 3(103)

Scientific journal

July–September, 2025

CONTENTS

Abdulkarimov F. A. Weak solvability Neumann problem for a global in time parabolic equation	5
Antipina E. V., Mustafina S. A., Antipin A. F. On the approximate solution of a nonlinear problem of optimal performance	20
Gimaltdinov I. K., Rodionov A. S., Gizatullin R. F., Kochanova E. Yu. The influence of bulk medium shielding on the dynamics of a shock wave impulse	36
Golykh R. N., Carrat J.-B. The model of the formation of short capillary waves on the «liquid-gas» interface under influence of pulsed shock disturbances due to ultrasonic cavitation	51
Dashevsky Yu. A., Surodina I. V., Eltsov I. N. Theoretical analysis and numerical simulation of conductometric sensor signals for estimation of associated fluid mineralization in a gas well	70
Saktoeva K. P., Laevsky Yu. M. CCODE library of programs for solving stiff systems of ordinary differential equations	82
Filimonov S. A., Minakov A. V. Development of a pore-network approach for modeling the transfer of modifying additives in the oil displacement process	104

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

prosp. Akad. Koptiyuga 4

Novosibirsk 630090, Russia

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

УДК 517.95

ОБОБЩЁННАЯ РАЗРЕШИМОСТЬ ЗАДАЧИ НЕЙМАНА ДЛЯ ГЛОБАЛЬНОГО ПО ВРЕМЕНИ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

© 2025 Ф. А. Абдукаримов

*Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 15, Новосибирск 630090, Россия*

E-mail: abdukarimovfarhod8@gmail.com

Поступила в редакцию 11.07.2024 г.; после доработки 23.06.2025 г.;
принята к публикации 17.09.2025 г.

Доказано существование обобщённого решения задачи Неймана для глобального по времени параболического уравнения. Глобальность означает, что в уравнении присутствует коэффициент, зависящий от интеграла от решения по всему интервалу времени, на котором решается задача. Для доказательства разрешимости используется метод Галёркина. Показано, что глобальное уравнение с однородным условием Неймана может иметь несколько решений, не зависящих от пространственных переменных.

Ключевые слова: глобальное по времени параболическое уравнение, задача Неймана, разрешимость, метод Галёркина, неединственность.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2025.28.301

1. ИССЛЕДУЕМАЯ ЗАДАЧА

Пусть Ω — ограниченная область в \mathbb{R}^n , $n \geq 2$, с липшицевой границей $\partial\Omega$. В пространственно-временном цилиндре $\Omega_T = \Omega \times (0, T)$, $T \in (0, \infty)$, рассмотрим следующую начально-краевую задачу:

$$\partial_t u - \Delta u + \varphi \left(\int_0^T u(\cdot, \tau) d\tau \right) u = f, \quad (1)$$

$$\frac{\partial u}{\partial \nu}(x, t) = \psi(x, t) \quad \text{при } x \in \partial\Omega, \quad t \in [0, T], \quad (2)$$

$$u(x, 0) = u_0(x) \quad \text{при } x \in \Omega, \quad (3)$$

где $x = (x_1, \dots, x_n)$ — пространственная переменная в \mathbb{R}^n , $t \in [0, T]$ — скалярная переменная, ν — вектор внешней нормали к $\partial\Omega$, $u : \Omega_T \rightarrow \mathbb{R}$ — искомая функция, $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$, $f : \Omega_T \rightarrow \mathbb{R}$, $\psi : \partial\Omega \times [0, T] \rightarrow \mathbb{R}$, $u_0 : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ — заданные функции, условия на которые будут выписаны ниже.

В уравнении (1) аргумент функции φ есть интеграл от решения u по всему интервалу времени $(0, T)$, на котором решается задача. Поэтому рассматриваемое уравнение будем называть глобальным (нелокальным) по времени. Нелокальность по времени вносит в начально-краевую задачу (1) — (3) несколько особенностей. Во-первых, присутствие в (1) интеграла от решения по всему интервалу времени $(0, T)$ означает, что нужно знать «будущее» для определения коэффициента в уравнении. Это не согласуется с принципом причинности, который характерен для параболических задач. Во-вторых, при исследовании разрешимости нелинейное параболическое уравнение часто сначала решается на малом промежутке времени, а затем полученное

решение продолжается на весь интервал $(0, T)$. В данной ситуации такой подход невозможно применить.

Задача Дирихле для глобального по времени уравнения возникает при моделировании хаотической динамики полимерной молекулы (цепочки) в водном растворе [1]. В этом случае функция φ называется потенциалом взаимодействия. Глобальность по времени возникает из-за того, что роль времени t в такой модели играет параметр длины дуги вдоль полимерной молекулы (общая длина цепочки равна T) и каждый сегмент цепочки взаимодействует с остальными через окружающую жидкость. В [2] доказана слабая разрешимость задачи для случая, когда u — положительная ограниченная функция, а φ — так называемый потенциал Флори — Хаггинса. Положительность решения является естественным условием, поскольку u соответствует (но не совпадает с ней, см. пояснения в следующем абзаце) плотности вероятности того, что t -й сегмент цепочки находится в точке $x \in \Omega$. Потенциал Флори — Хаггинса — это выпуклая возрастающая функция, стремящаяся к бесконечности по мере приближения её аргумента к определённому положительному значению. В [3] функция φ предполагается неотрицательной и непрерывной такой, что $s \mapsto s\varphi(s)$ является неубывающей дифференцируемой функцией, производная которой ограничена на каждом компактном подмножестве \mathbb{R} . Это предположение допускает случай, когда функция φ не выпукла и не растёт при стремлении аргумента к бесконечности. В работе [3] доказано существование слабого решения и установлена единственность решения при ограничении на длину интервала времени T . Уравнение более общего вида по сравнению с работами [2], [3] рассмотрено в [4]: добавлена ненулевая правая часть f , потенциал взаимодействия φ зависит от взвешенного интеграла от решения по всему интервалу времени, на котором рассматривается задача. Кроме того, ослаблены требования на функцию φ : она предполагается непрерывной и ограниченной снизу.

В указанных выше работах [2]–[4] изучались нелокальные по времени уравнения, которые соответствуют модели хаотического движения полимерной молекулы в водном растворе, но не совпадают с ней. Дело в том, что непосредственно в самой модели хаотической динамики полимерной цепочки аргумент потенциала φ есть интеграл по интервалу $(0, T)$ от функции $\varrho(x, t)$ — плотности вероятности того, что t -й сегмент цепочки находится в точке $x \in \Omega$. Функция ϱ связана с решением задачи u следующим нормировочным условием:

$$\varrho(x, t) = \frac{u(x, t)}{\int_{\Omega} u(y, t) dy}.$$

Это условие гарантирует, что пространственный интеграл от ϱ , представляющий собой вероятность того, что каждое звено цепи находится в области Ω , равен единице. Появление функции ϱ в аргументе потенциала φ делает уравнение модели нелокальным не только по времени, но и по пространству. Нелокальность по пространству возникает при делении решения u на интеграл от него по области Ω . Значит, данный интеграл не должен обращаться в нуль на множестве положительной одномерной меры Лебега в $(0, T)$. В работе [5] для случая ограниченного потенциала взаимодействия φ удалось показать, что этот интеграл больше некоторой положительной константы. Это позволило доказать обобщённую разрешимость. Уравнение с двойной нелокальностью как по времени, так и по пространству изучалось также в [6]. Нелокальность по пространству в указанной работе носит другой характер: она связана не с условием нормировки, а с наличием интегро-дифференциального оператора Леви вместо лапласиана в уравнении (1). В работе [6] установлено существование слабого решения и доказана единственность решения для достаточно малого T .

Глобальные по времени параболические уравнения возникают также при моделировании динамики популяций (см. [7], [8]). В таких моделях уравнение является ультрапараболическим, и роль второго времени в нём играет возраст особей. Нелокальные члены содержат интеграл по возрасту особи и могут быть как в данных задачи, так и в уравнении.

Насколько нам известно, на сегодняшний день глобальные по времени параболические уравнения изучались с граничным условием Дирихле. В данной работе исследуется такое уравнение с краевым условием Неймана. Как было отмечено в предыдущем абзаце, глобальные по времени уравнения применяются при моделировании динамики популяций. Условие Неймана на границе пространственной области в таких моделях соответствует заданию миграции особей через границу. В настоящей работе доказана обобщённая разрешимость задачи (1)–(3) для неотрицательной непрерывной функции φ , ненулевой правой части f и неоднородного краевого условия ψ . Существование обобщённого решения доказывается методом Галёркина, так как он соответствует методу конечных элементов, который часто используется при численных расчётах параболических задач. Кроме того, в данной работе показано, что глобальное уравнение (1) с однородным условием Неймана может иметь несколько решений, не зависящих от пространственных переменных. Из-за возможной неединственности решения задачи (1)–(3) могут возникнуть проблемы с численным построением галёркинских приближений.

2. ОБОБЩЁННАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ОСНОВНОЙ РЕЗУЛЬТАТ

Мы будем работать со стандартными функциональными пространствами Лебега и Соболева $L^p(\Omega)$, $H^1(\Omega)$, $L^q(0, T; L^p(\Omega))$ и $L^q(0, T; H^1(\Omega))$, где $p, q \in [1, \infty]$. Норму и скалярное произведение в $L^2(\Omega)$ будем обозначать через $\|\cdot\|$ и (\cdot, \cdot) соответственно. Скалярное произведение в $H^1(\Omega)$ определяется формулой $(u, v)_{H^1(\Omega)} = (u, v) + (\nabla u, \nabla v)$.

Определение. Пусть $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ — непрерывная неотрицательная функция, $T \in (0, \infty)$, $f \in L^2(\Omega_T)$, $\psi \in L^2(0, T; L^2(\partial\Omega))$, $u_0 \in L^2(\Omega)$. Функцию $u : \Omega_T \rightarrow \mathbb{R}$ из $L^2(0, T; H^1(\Omega))$ назовём обобщённым решением задачи (1) — (3), если интегральное тождество

$$\int_0^T \int_{\Omega} (u \partial_t h - \nabla u \cdot \nabla h - \varphi(\zeta) u h + f h) dx d\tau + \int_0^T \int_{\partial\Omega} \psi h dS d\tau + \int_{\Omega} u_0 h_0 dx = 0$$

выполняется для любой гладкой в Ω_T функции h , такой что $h(\cdot, t) = 0$ при $t = T$. Здесь $\zeta(x) = \int_0^T u(x, \tau) d\tau$, $h_0 = h|_{t=0}$.

Основным результатом данной работы является следующее утверждение об обобщённой разрешимости задачи (1)–(3).

Теорема 1. Пусть $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ — непрерывная неотрицательная функция, $T \in (0, \infty)$, $f \in L^2(\Omega_T)$, $\psi \in L^2(0, T; L^2(\partial\Omega))$, $u_0 \in L^2(\Omega)$. Тогда существует обобщённое решение $u \in L^\infty(0, T; L^2(\Omega)) \cap L^2(0, T; H^1(\Omega))$ задачи (1) — (3). Кроме того, существует положительная постоянная C_1 , такая что для u выполняется следующая энергетическая оценка

$$\operatorname{ess\,sup}_{t \in [0, T]} \|u(\cdot, t)\|^2 + \|u\|_{L^2(0, T; H^1(\Omega))}^2 + \int_0^T \int_{\Omega} \varphi(\zeta(x)) u^2(x, \tau) dx d\tau \leq C_1.$$

Постоянная C_1 зависит от f , ψ , u_0 , Ω и T .

3. ДОКАЗАТЕЛЬСТВО РАЗРЕШИМОСТИ

В этом разд. доказывается теорема 1 о существовании обобщённого решения задачи (1)–(3). Доказательство проводится с помощью метода Галёркина и состоит из двух этапов: а) построение галёркинских приближений, б) предельный переход. Для удобства первый этап разделён на два шага. На первом шаге получаются априорные оценки приближений, на следующем — на основе этих оценок и теоремы Шаудера о неподвижной точке вполне непрерывного

оператора (см. [9, гл. 8, § 35]) доказываемое существование галёркинских приближений. На втором этапе доказательства возникает трудность с предельным переходом в нелинейном члене, которая устраняется с помощью теоремы Витали о предельном переходе под знаком интеграла (см. [10, гл. 4, § 8]).

3.1. Построение галёркинских приближений

Пусть функции $\{w_k\}_{k \in \mathbb{N}} \subset C(\overline{\Omega})$ образуют ортонормированный базис в пространстве $L^2(\Omega)$ и ортогональный базис в $H^1(\Omega)$. Например, в качестве $\{w_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ можно взять собственные функции оператора Лапласа $(-\Delta)$ в области Ω с однородным краевым условием Неймана на $\partial\Omega$ (см. [11, гл. 2, § 5]). Зафиксируем натуральное число m . Будем искать галёркинское приближение $u_m(x, t) = \sum_{i=1}^m c_i(t)w_i(x)$ такое, что при $k = 1, \dots, m$

$$(u'_m, w_k) + (\nabla u_m, \nabla w_k) + (\varphi(\zeta_m)u_m, w_k) = (f, w_k) + \int_{\partial\Omega} \psi w_k dS, \quad (4)$$

$$(u_m, w_k)|_{t=0} = (u_0, w_k), \quad (5)$$

где $\zeta_m(x) = \int_0^T u_m(x, \tau) d\tau$, u'_m — производная по переменной t . Соотношения (4) есть система из m интегро-дифференциальных уравнений на коэффициенты $c_k(t)$ с начальными условиями (5). Запишем (4), (5), подставив $u_m(x, t) = \sum_{i=1}^m c_i(t)w_i(x)$ и воспользовавшись равенством $(\nabla w_i, \nabla w_k) = 0$, $i \neq k$, которое следует из того, что базис $\{w_k\}_{k \in \mathbb{N}}$ ортогонален как в $L^2(\Omega)$, так и в $H^1(\Omega)$. Получим для $k = 1, \dots, m$

$$c'_k(t) + \|\nabla w_k\|^2 c_k(t) + \sum_{i=1}^m (\varphi(\zeta_m)w_i, w_k)c_i(t) = (f, w_k) + \int_{\partial\Omega} \psi w_k dS, \quad (6)$$

$$c_k(0) = (u_0, w_k). \quad (7)$$

3.1.1. Априорные оценки галёркинских приближений.

Необходимые априорные оценки для галёркинских приближений получены в следующей лемме.

Лемма 1. *Существуют константы C_1 и $C_2(m)$, такие что*

$$\max_{t \in [0, T]} \|u_m(\cdot, t)\|^2 + \|u_m\|_{L^2(0, T; H^1(\Omega))}^2 + \int_0^T \int_{\Omega} \varphi(\zeta_m) u_m^2 dx d\tau \leq C_1, \quad (8)$$

$$\|u'_m\|_{L^2(\Omega_T)}^2 \leq C_2(m). \quad (9)$$

Замечание 1. Отметим, что в энергетической оценке, сформулированной в теореме 1, постоянная C_1 та же, что и в неравенстве (8).

Доказательство. Умножим k -е уравнение в (4) на $c_k(t)$ и просуммируем по $k = 1, \dots, m$

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u_m\|^2 + \|\nabla u_m\|^2 + (\varphi(\zeta_m)u_m, u_m) = (f, u_m) + \int_{\partial\Omega} \psi u_m dS. \quad (10)$$

Первое слагаемое в правой части (10) оценим с помощью неравенства Коши — Буняковского и неравенства Юнга

$$(f, u_m) \leq \|f\| \|u_m\| \leq \frac{1}{2} \|f\|^2 + \frac{1}{2} \|u_m\|^2.$$

Оценим второе слагаемое в правой части (10), снова используя неравенство Коши — Буняковского и неравенство Юнга, а также ограниченность оператора следа, действующего из $H^1(\Omega)$ в $L^2(\partial\Omega)$,

$$\int_{\partial\Omega} \psi u_m dS \leq \|\psi\|_{L^2(\partial\Omega)} \|u_m\|_{L^2(\partial\Omega)} \leq c \|\psi\|_{L^2(\partial\Omega)} \|u_m\|_{H^1(\Omega)} \leq \frac{c^2}{2} \|\psi\|_{L^2(\partial\Omega)}^2 + \frac{1}{2} \|u_m\|_{H^1(\Omega)}^2,$$

где c есть норма оператора следа. С учётом полученных неравенств перепишем (10)

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u_m\|^2 + \|\nabla u_m\|^2 + (\varphi(\zeta_m) u_m, u_m) \leq \frac{1}{2} \|f\|^2 + \frac{1}{2} \|u_m\|^2 + \frac{c^2}{2} \|\psi\|_{L^2(\partial\Omega)}^2 + \frac{1}{2} \|u_m\|_{H^1(\Omega)}^2.$$

Так как $\|u_m\|_{H^1(\Omega)}^2 = \|u_m\|^2 + \|\nabla u_m\|^2$, то из предыдущего неравенства следует, что

$$\frac{d}{dt} \|u_m\|^2 + \|\nabla u_m\|^2 + (\varphi(\zeta_m) u_m, u_m) \leq 2 \|u_m\|^2 + c_{f\psi}, \quad (11)$$

где $c_{f\psi} = \|f\|^2 + c^2 \|\psi\|_{L^2(\partial\Omega)}^2$ — функция от переменной t . В силу неотрицательности φ из (11) вытекает оценка $\frac{d}{dt} \|u_m\|^2 \leq 2 \|u_m\|^2 + c_{f\psi}$, из которой по неравенству Гронуолла имеем

$$\|u_m(\cdot, t)\|^2 \leq e^{2t} \left(\|u_m(\cdot, 0)\|^2 + \int_0^t c_{f\psi} d\tau \right) \quad \text{для всех } t \in [0, T].$$

Отсюда, так как $\|u_m(\cdot, 0)\|^2 = \sum_{i=1}^m (u_0, w_i)^2 \leq \|u_0\|^2$, приходим к оценке

$$\max_{t \in [0, T]} \|u_m\|^2 \leq e^{2T} \left(\|u_0\|^2 + \int_0^T c_{f\psi} d\tau \right). \quad (12)$$

Интегрируя (11) от 0 до T , с учётом (12) получим

$$\int_0^T \|\nabla u_m\|^2 d\tau + \int_0^T (\varphi(\zeta_m) u_m, u_m) d\tau \leq (2Te^{2T} + 1) \left(\|u_0\|^2 + \int_0^T c_{f\psi} d\tau \right). \quad (13)$$

Из неравенств (12), (13) вытекает оценка (8).

Оценим производные галёркинских приближений. Для этого умножим k -е уравнение в (4) на $c'_k(t)$ и просуммируем по k

$$\|u'_m\|^2 + \frac{1}{2} \frac{d}{dt} \left(\|\nabla u_m\|^2 + (\varphi(\zeta_m) u_m, u_m) \right) = (f, u'_m) + \int_{\partial\Omega} \psi u'_m dS. \quad (14)$$

Оценим первое слагаемое в правой части (14), используя неравенство Коши — Буняковского и неравенство Юнга,

$$(f, u'_m) \leq \|f\| \|u'_m\| \leq \|f\|^2 + \frac{1}{4} \|u'_m\|^2.$$

Получим оценку для второго слагаемого, подставив $u'_m = \sum_{i=1}^m c'_i w_i$ и снова воспользовавшись неравенством Юнга,

$$\int_{\partial\Omega} \psi u'_m dS = \sum_{i=1}^m c'_i \int_{\partial\Omega} \psi w_i dS \leq \frac{1}{4} \sum_{i=1}^m (c'_i)^2 + \sum_{i=1}^m \left(\int_{\partial\Omega} \psi w_i dS \right)^2.$$

Замечая, что $\|u'_m\|^2 = \sum_{i=1}^m (c'_i)^2$, выводим

$$\int_{\partial\Omega} \psi u'_m dS \leq \frac{1}{4} \|u'_m\|^2 + \sum_{i=1}^m \left(\int_{\partial\Omega} \psi w_i dS \right)^2.$$

Наконец, учитывая полученные оценки на правую часть, из (14) приходим к неравенству

$$\|u'_m\|^2 + \frac{d}{dt} \left(\|\nabla u_m\|^2 + (\varphi(\zeta_m) u_m, u_m) \right) \leq 2\|f\|^2 + 2 \sum_{i=1}^m \left(\int_{\partial\Omega} \psi w_i dS \right)^2,$$

из которого после интегрирования от 0 до T извлекаем оценку

$$\|u'_m\|_{L^2(\Omega_T)}^2 \leq \|\nabla u_m(\cdot, 0)\|^2 + \int_{\Omega} \varphi(\zeta_m) u_m^2(x, 0) dx + 2\|f\|_{L^2(\Omega_T)}^2 + 2 \sum_{i=1}^m \int_0^T \left(\int_{\partial\Omega} \psi w_i dS \right)^2 d\tau.$$

В силу непрерывности функции φ найдётся константа $\alpha_m > 0$, такая что $\varphi(\xi) \leq \alpha_m$ для всех ξ , удовлетворяющих неравенству $\min_{x \in \overline{\Omega}} \zeta_m(x) \leq \xi \leq \max_{x \in \overline{\Omega}} \zeta_m(x)$. Поэтому

$$\int_{\Omega} \varphi(\zeta_m) u_m^2(x, 0) dx \leq \alpha_m \|u_m(\cdot, 0)\|^2 \leq \alpha_m \|u_0\|^2,$$

откуда следует оценка (9). □

3.1.2. Доказательство существования галёркинских приближений.

Используя оценки из леммы 1, докажем существование галёркинских приближений с помощью следующей теоремы Шаудера о неподвижной точке вполне непрерывного оператора (см. [9, гл. 8, § 35]).

Теорема (Шаудера о неподвижной точке). Пусть оператор F отображает замкнутое ограниченное выпуклое множество K банахова пространства X в себя. Тогда, если F вполне непрерывен на K , то он имеет на K неподвижную точку.

Лемма 2. Для каждого $m \in \mathbb{N}$ существует функция $u_m(x, t) = \sum_{i=1}^m c_i(t) w_i(x)$, которая является решением задачи (4), (5).

Доказательство. Пусть в обозначениях теоремы Шаудера $X = C(0, T)$ — пространство непрерывных на $[0, T]$ функций $\theta(t) = (\theta_1(t), \theta_2(t), \dots, \theta_m(t))$ с нормой

$$|\theta| = \max_{0 \leq t \leq T} \left(\sum_{i=1}^m \theta_i^2(t) \right)^{1/2}.$$

Определим замкнутое ограниченное выпуклое множество в $C(0, T)$

$$K = \{\theta \mid |\theta| \leq e^T \left(\|u_0\|^2 + \int_0^T c_{f\psi} d\tau \right)^{1/2}, \quad \theta_i(0) = (u_0, w_i), \quad i = 1, 2, \dots, m\},$$

где $c_{f\psi} = \|f\|^2 + c^2\|\psi\|_{L^2(\partial\Omega)}^2$ — функция от переменной t из (12). Пусть $\xi(t) = (\xi_1(t), \xi_2(t), \dots, \xi_m(t))$ — произвольный элемент множества K . Для функции $u_\xi = \sum_{i=1}^m \xi_i w_i$ обозначим $\zeta_\xi(x) = \int_0^T u_\xi(x, \tau) d\tau$ и найдём решение $u_\eta = \sum_{i=1}^m \eta_i w_i$ системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$(u'_\eta, w_k) + (\nabla u_\eta, \nabla w_k) + (\varphi(\zeta_\xi)u_\eta, w_k) = (f, w_k) + \int_{\partial\Omega} \psi w_k dS, \quad (15)$$

$$(u_\eta, w_k)|_{t=0} = (u_0, w_k), \quad (16)$$

где $k = 1, \dots, m$.

Подставив $u_\eta = \sum_{i=1}^m \eta_i w_i$ в (15), (16), приходим к линеаризации задачи (6), (7)

$$\begin{aligned} \eta'_k(t) + \|\nabla w_k\|^2 \eta_k(t) + \sum_{i=1}^m (\varphi(\zeta_\xi)w_i, w_k) \eta_i(t) &= (f, w_k) + \int_{\partial\Omega} \psi w_k dS, \quad k = 1, \dots, m, \\ \eta_k(0) &= (u_0, w_k), \quad k = 1, \dots, m. \end{aligned}$$

Как известно из теории линейных дифференциальных уравнений у получившейся задачи существует единственное решение $\eta(t) = (\eta_1(t), \eta_2(t), \dots, \eta_m(t))$. Таким образом, задано отображение $F : K \rightarrow C(0, T)$, действующее по правилу $F(\xi) = \eta$. Убедимся в справедливости оценки $|\eta| \leq e^T \left(\|u_0\|^2 + \int_0^T c_{f\psi} d\tau \right)^{1/2}$, из которой следует, что множество K отображается оператором F в себя. Для этого в (15) умножим k -е уравнение на η_k и повторим вывод оценки (12) из доказательства леммы 1.

Докажем непрерывность оператора F . Возьмём произвольную последовательность $\{\xi_q\}$ в K , которая сходится в $C(0, T)$ к некоторой функции ξ . Обозначая $\eta_q = F(\xi_q)$, $\eta = F(\xi)$ и $u_{\eta_q} = \sum_{i=1}^m \eta_{qi} w_i$, $u_\eta = \sum_{i=1}^m \eta_i w_i$, получим, что разность $u_{\eta_q} - u_\eta$ является решением следующей задачи:

$$\begin{aligned} (u'_{\eta_q} - u'_\eta, w_k) + (\nabla(u_{\eta_q} - u_\eta), \nabla w_k) + (\varphi(\zeta_{\xi_q})(u_{\eta_q} - u_\eta), w_k) &= ((\varphi(\zeta_\xi) - \varphi(\zeta_{\xi_q}))u_\eta, w_k), \\ (u_{\eta_q} - u_\eta, w_k)|_{t=0} &= 0, \end{aligned}$$

где $k = 1, \dots, m$. Значит, для неё справедливо неравенство

$$\frac{1}{2} \frac{d}{dt} \|u_{\eta_q} - u_\eta\|^2 + \|\nabla(u_{\eta_q} - u_\eta)\|^2 + (\varphi(\zeta_{\xi_q})(u_{\eta_q} - u_\eta), u_{\eta_q} - u_\eta) \leq \|(\varphi(\zeta_\xi) - \varphi(\zeta_{\xi_q}))u_\eta\| \|u_{\eta_q} - u_\eta\|,$$

интегрируя которое от 0 до t , получим

$$\|(u_{\eta_q} - u_\eta)(\cdot, t)\|^2 \leq 2 \int_0^t \|(\varphi(\zeta_\xi) - \varphi(\zeta_{\xi_q}))u_\eta\| \|u_{\eta_q} - u_\eta\| d\tau.$$

Отсюда, вынося $\max_{(x,t) \in \bar{Q}_T} u_\eta^2$ за знак интеграла и замечая, что верна равномерная по q оценка

$$\max_{t \in [0, T]} \|(u_{\eta_q} - u_\eta)(\cdot, t)\| \leq 2e^T \left(\|u_0\|^2 + \int_0^T c_{f\psi} d\tau \right)^{1/2},$$

приходим к неравенству

$$|\boldsymbol{\eta}_q - \boldsymbol{\eta}| = \max_{t \in [0, T]} \|(u_{\eta_q} - u_{\eta})(\cdot, t)\| \leq C \|\varphi(\zeta_{\xi}) - \varphi(\zeta_{\xi_q})\|^{1/2}$$

с некоторой константой C , не зависящей от q .

Из того, что $\xi_q \rightarrow \xi$ в $C(0, T)$ следует поточечная сходимость $\zeta_{\xi_q}(x) \rightarrow \zeta_{\xi}(x)$ в Ω , из которой в силу непрерывности функции φ вытекает поточечная сходимость $\varphi(\zeta_{\xi_q}(x)) \rightarrow \varphi(\zeta_{\xi}(x))$ в Ω . По теореме Лебега о предельном переходе под знаком интеграла $\|\varphi(\zeta_{\xi}) - \varphi(\zeta_{\xi_q})\| \rightarrow 0$ при $q \rightarrow \infty$, поэтому из предыдущего неравенства $\boldsymbol{\eta}_q \rightarrow \boldsymbol{\eta}$ в $C(0, T)$. Таким образом, непрерывность оператора F доказана.

Осталось проверить, что F отображает K в компактное подмножество из K . Для этого выведем оценки на производные $\eta_k(t)$. Умножим k -е уравнение системы (15) на $\eta'_k(t)$ и просуммируем по k . Далее, повторив вывод оценки (9) из леммы 1, получим неравенство

$$\int_0^T \|u'_\eta\|^2 d\tau \leq C_2(m),$$

из которого следует, что $F(K)$ есть ограниченное множество в $H^1(0, T)$. Значит, по теореме вложения множество $F(K)$ есть компакт в $C(0, T)$.

Оператор F удовлетворяет всем условиям теоремы Шаудера, поэтому имеет на множестве K неподвижную точку ξ , которая является решением задачи (6), (7). \square

3.2. Предельный переход

В силу равномерной оценки (8) из последовательности u_m можно выделить такую подпоследовательность u_μ , что

$$u_\mu \rightarrow u \quad \text{*}-\text{слабо в } L^\infty(0, T; L^2(\Omega)), \quad (17)$$

$$u_\mu \rightharpoonup u \quad \text{слабо в } L^2(\Omega_T), \quad (18)$$

$$u_\mu \rightharpoonup u \quad \text{слабо в } L^2(0, T; H^1(\Omega)). \quad (19)$$

Зафиксируем натуральное число N и выберем функцию $h \in C^1(0, T; H^1(\Omega))$ вида

$$h(x, t) = \sum_{k=1}^N g_k(t) w_k(x), \quad (20)$$

где $\{g_k\}_{k=1}^N$ — заданные гладкие функции, $g_k(T) = 0$, $k = 1, \dots, N$. Выберем $m \geq N$, умножим (4) на $g_k(t)$, просуммируем по $k = 1, \dots, N$ и затем проинтегрируем от 0 до T . Получим

$$\int_0^T (u'_m, h) + (\nabla u_m, \nabla h) + (\varphi(\zeta_m) u_m, h) d\tau = \int_0^T \left((f, h) + \int_{\partial\Omega} \psi h dS \right) d\tau.$$

Перепишем первое слагаемое, воспользовавшись формулой интегрирования по частям и тем, что $h|_{t=T} = 0$

$$- \int_0^T (u_m, \partial_t h) + (\nabla u_m, \nabla h) + (\varphi(\zeta_m) u_m, h) d\tau - \int_{\Omega} u_m(x, 0) h_0 dx = \int_0^T \left((f, h) + \int_{\partial\Omega} \psi h dS \right) d\tau.$$

Положим $m = \mu$ и воспользуемся (18), (19)

$$-\int_0^T (u, \partial_t h) + (\nabla u, \nabla h) d\tau + \lim_{\mu \rightarrow \infty} \int_0^T \int_{\Omega} \varphi(\zeta_\mu) u_\mu h dx d\tau - \int_{\Omega} u_0 h_0 dx = \int_0^T \left((f, h) + \int_{\partial\Omega} \psi h dS \right) d\tau.$$

Проблема в том, чтобы доказать следующее соотношение

$$\lim_{\mu \rightarrow \infty} \int_0^T \int_{\Omega} \varphi(\zeta_\mu) u_\mu h dx d\tau = \int_0^T \int_{\Omega} \varphi(\zeta) u h dx d\tau. \quad (21)$$

Обозначим через $R = \max_{(x,t) \in \overline{\Omega}_T} |h(x,t)|$. Покажем, что

$$\varphi(\zeta_\mu) \int_0^T u_\mu h d\tau \rightarrow \varphi(\zeta) \int_0^T u h d\tau \quad \text{при } \mu \rightarrow \infty \text{ в } L^1(\Omega). \quad (22)$$

При доказательстве (22) будем рассуждать, так же как в [4, Theorem 2, Step 3], используя следующую теорему Витали о предельном переходе под знаком интеграла (см. [10, гл. 4, §8]).

Теорема (Витали о предельном переходе). Пусть $\{z_k\}_{k \geq 1}$ — последовательность суммируемых функций, сходящаяся на Ω к функции z по мере. Если $|\Omega| < \infty$ и функции z_k имеют равномерно абсолютно непрерывные интегралы, то функция z суммируема и $\int_{\Omega} |z_k - z| dx \rightarrow 0$ при $k \rightarrow \infty$.

Из (18) вытекает, что $\int_0^T u_\mu h d\tau \rightharpoonup \int_0^T u h d\tau$ слабо в $L^2(\Omega)$. В силу (8) верно неравенство $\|\nabla \int_0^T u_\mu h d\tau\| \leq C$, где константа C зависит от функции h . Значит,

$$\int_0^T u_\mu h d\tau \rightarrow \int_0^T u h d\tau \quad \text{в } L^2(\Omega).$$

Отсюда, замечая, что аналогично получается $\zeta_\mu \rightarrow \zeta$ в $L^2(\Omega)$, вытекает (переходя к подпоследовательности, которую мы обозначаем так же, как и саму последовательность)

$$\int_0^T u_\mu h d\tau \rightarrow \int_0^T u h d\tau \quad \text{почти всюду в } \Omega, \quad \zeta_\mu \rightarrow \zeta \quad \text{почти всюду в } \Omega.$$

Так как φ непрерывна, $\varphi(\zeta_\mu) \rightarrow \varphi(\zeta)$ почти всюду в Ω . Получаем, что

$$\varphi(\zeta_\mu) \int_0^T u_\mu h d\tau \rightarrow \varphi(\zeta) \int_0^T u h d\tau \quad \text{почти всюду в } \Omega \text{ при } \mu \rightarrow \infty.$$

Докажем, что последовательность $\varphi(\zeta_\mu) \int_0^T u_\mu h d\tau$ имеет равномерно абсолютно непрерывные интегралы на Ω . Пусть E — произвольное измеримое подмножество Ω , $E_T = E \times [0, T]$ и $G_M^\mu = \{(x, t) \in E_T \mid |u_\mu(x, t)| \geq M\}$. Тогда

$$\int_{G_M^\mu} \varphi(\zeta_\mu) |u_\mu h| dx d\tau \leq \frac{R}{M} \int_{G_M^\mu} \varphi(\zeta_\mu) u_\mu^2 dx d\tau \leq \frac{R}{M} \int_{\Omega_T} \varphi(\zeta_\mu) u_\mu^2 dx d\tau \leq \frac{C_1 R}{M},$$

где C_1 — константа из (8).

С другой стороны,

$$\int_{E_T \setminus G_M^\mu} \varphi(\zeta_\mu) |u_\mu h| dx d\tau \leq MR \int_{E_T \setminus G_M^\mu} \varphi(\zeta_\mu) dx d\tau \leq MRT \int_E \varphi(\zeta_\mu) dx.$$

Таким образом,

$$\left| \int_E \varphi(\zeta_\mu) \int_0^T u_\mu h d\tau dx \right| = \left| \int_{E_T} \varphi(\zeta_\mu) u_\mu h dx d\tau \right| \leq \frac{C_1 R}{M} + MRT \int_E \varphi(\zeta_\mu) dx. \quad (23)$$

Оценим $\int_E \varphi(\zeta_\mu) dx$. Если $E_N^\mu = \{x \in E \mid |\zeta_\mu(x)| > N\}$, то

$$\int_{E_N^\mu} \varphi(\zeta_\mu) dx \leq \frac{1}{N^2} \int_{E_N^\mu} \varphi(\zeta_\mu) \zeta_\mu^2 dx \leq \frac{C_1 T}{N^2}.$$

В силу непрерывности функции φ найдётся константа $\gamma_N > 0$, такая что $\varphi(\xi) \leq \gamma_N$ для всех $\xi \in [-N, N]$. Следовательно,

$$\int_{E \setminus E_N^\mu} \varphi(\zeta_\mu) dx \leq \gamma_N |E|,$$

где $|E|$ — n -мерная мера Лебега множества E . В итоге,

$$\int_E \varphi(\zeta_\mu) dx \leq \frac{C_1 T}{N^2} + \gamma_N |E|.$$

Поэтому из (23) вытекает

$$\left| \int_E \varphi(\zeta_\mu) \int_0^T u_\mu h d\tau dx \right| \leq \frac{C_1 R}{M} + \frac{MRT^2 C_1}{N^2} + \gamma_N MRT |E|.$$

Для произвольного $\varepsilon > 0$ выберем M и N так, что $C_1 R/M < \varepsilon/3$ и $MRT^2 C_1/N^2 < \varepsilon/3$. Если $\delta = \varepsilon/(3\gamma_N MRT)$, то верна оценка

$$\left| \int_E \varphi(\zeta_\mu) \int_0^T u_\mu h d\tau dx \right| < \varepsilon, \quad \text{когда} \quad |E| < \delta,$$

которая означает, что последовательность $\varphi(\zeta_\mu) \int_0^T u_\mu h d\tau$ имеет равномерно абсолютно непрерывные интегралы в Ω . Условия теоремы Витали выполнены, поэтому сходимость (22), из которой вытекает предельный переход (21), доказана.

Функции вида (20) плотны во множестве $\{a \in H^1(\Omega_T) \mid a|_{t=T} = 0\}$, поэтому интегральное тождество из определения обобщённого решения справедливо для любой гладкой в Ω_T функции $h(\cdot, t)$, такой что $h|_{t=T} = 0$.

Энергетическая оценка для обобщённого решения u , сформулированная в теореме 1, получается из (8) в результате предельного перехода при $m = \mu \rightarrow \infty$. Предельный переход

в первых двух слагаемых левой части (8) следует из (17), (19) и слабой полунепрерывности снизу норм в $L^\infty(0, T; L^2(\Omega))$ и $L^2(0, T; H^1(\Omega))$. Для третьего слагаемого переход к пределу доказан в [4, Theorem 2, Step 4]. Таким образом, установлена энергетическая оценка для решения u . Теорема 1 доказана. \square

4. О ВОЗМОЖНОЙ НЕЕДИНСТВЕННОСТИ РЕШЕНИЯ

В этом разд. будет показано, что однородная задача Неймана (1)–(3) может иметь несколько решений, не зависящих от пространственных переменных. Рассмотрим (1)–(3) с $f = 0$, $\psi = 0$, $u_0 \equiv \text{const}$

$$\partial_t u - \Delta u + \varphi \left(\int_0^T u(x, \tau) d\tau \right) u = 0, \quad (24)$$

$$\frac{\partial u}{\partial \nu}(x, t) = 0 \quad \text{при } x \in \partial\Omega, \quad t \in [0, T], \quad (25)$$

$$u(x, 0) = u_0 \quad \text{при } x \in \Omega. \quad (26)$$

Будем искать решение вида $u(x, t) = \xi(t)$. Очевидно, что краевое условие Неймана (25) выполняется, так как такое решение не зависит от пространственных переменных. После подстановки $u(x, t) = \xi(t)$ в уравнение (24) получим задачу Коши для интегро-дифференциального уравнения

$$\begin{aligned} \dot{\xi}(t) + \varphi \left(\int_0^T \xi(\tau) d\tau \right) \xi(t) &= 0, \quad t \in [0, T], \\ \xi(0) &= u_0. \end{aligned} \quad (27)$$

Замечание 2. Если $\varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ является неотрицательной непрерывной монотонной функцией, то нетрудно показать, рассуждая «от противного», единственность решения задачи (27).

Покажем, что решение (27) имеет вид $\xi(t) = u_0 e^{at}$, где $a \leq 0$. Действительно, если функция $\xi(t)$ есть решение (27), то $\varphi \left(\int_0^T \xi(\tau) d\tau \right) \geq 0$ — некоторое заданное число. Обозначим $a = -\varphi \left(\int_0^T \xi(\tau) d\tau \right) \leq 0$. Тогда $\xi(t)$ решает следующую задачу:

$$\begin{aligned} \dot{\xi}(t) - a\xi(t) &= 0, \quad t \in [0, T], \\ \xi(0) &= u_0, \end{aligned}$$

поэтому $\xi(t) = u_0 e^{at}$, где $a \leq 0$.

Пусть $u_0 \neq 0$. Подставим $\xi(t) = u_0 e^{at}$ в (27) для получения уравнения на a :

$$u_0 a e^{at} + \varphi \left(u_0 \frac{e^{at}}{a} \Big|_0^T \right) u_0 e^{at} = 0.$$

После сокращения на $u_0 e^{at}$

$$-a = \varphi \left(u_0 \frac{(e^{Ta} - 1)}{a} \right). \quad (28)$$

В силу замечания 2, чтобы показать неединственность решения необходимо взять немонотонную функцию φ . Положим $\varphi(\xi) = 1 + \sin \xi$, $u_0 = 5$, $T = 3$. Тогда уравнение (28) будет иметь три корня a_1 , a_2 , a_3 . Ниже показано графическое решение этого уравнения.

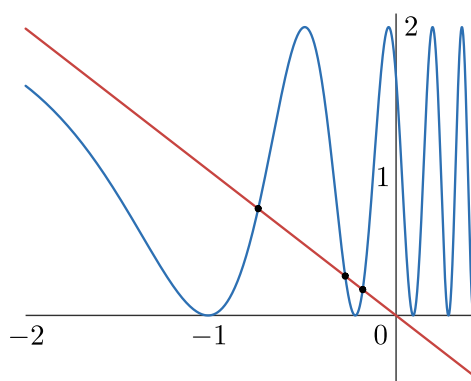


Рис. 1. Неединственность решения при $\varphi(\xi) = 1 + \sin \xi$, $u_0 = 5$, $T = 3$

Красным цветом показан график функции $(-a)$, стоящей в левой части уравнения, синим цветом — график $1 + \sin \left(u_0 \frac{(e^{Ta} - 1)}{a} \right)$ из правой части уравнения (28). Функции $(-a)$ и $1 + \sin \left(u_0 \frac{(e^{Ta} - 1)}{a} \right)$ пересекаются в трёх точках, которые выделены на рисунке чёрными кругами. Абсциссы точек пересечения графиков и есть корни a_1, a_2, a_3 уравнения (28). Им соответствуют три решения задачи Коши (27) с $u_0 = 5$: $\xi_i(t) = 5e^{a_i t}$, $i = 1, 2, 3$. Таким образом, построены три решения $u_i(x, t) = \xi_i(t) = 5e^{a_i t}$, $i = 1, 2, 3$, однородной задачи Неймана (24)–(26).

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 23-21-00261, <https://rscf.ru/project/23-21-00261/>). 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. Starovoitov V.N, Starovoitova B.N. Modeling the dynamics of polymer chains in water solution. Application to sensor design J. Physics: Conf. Series. 2017. V. 894, Article 012088; DOI: 10.1088/1742-6596/894/1/012088
2. Starovoitov V.N. Initial boundary value problem for a nonlocal in time parabolic equation Siberian Electronic Math. Reports. 2018. V. 15. P. 1311–1319; DOI: 10.17377/semi.2018.15.107
3. Starovoitov V.N. Boundary value problem for a global-in-time parabolic equation // Math. Meth. Appl. Sci. 2021. V. 44, Iss. 1. P. 1118–1126; DOI: 10.1002/mma.6816
4. Starovoitov V.N. Weak solvability of a boundary value problem for a parabolic equation with a global-in-time term that contains a weighted integral // J. Elliptic and Parabolic Equ. 2021. V. 7, Iss. 2. P. 623–634; DOI: 10.1007/s41808-021-00103-2
5. Старовойтов В.Н. Разрешимость краевой задачи о хаотичной динамике полимерной молекулы в случае ограниченного потенциала взаимодействия // Сиб. электрон. мат. изв. 2021. Т. 18, № 2. С. 1714–1719; DOI: 10.33048/semi.2081.18.131
6. Djida J.-D., Foghem Gounoue G.F., Tchaptchie Y.K. Nonlocal complement value problem for a global in time parabolic equation // J. Elliptic and Parabolic Equations. 2022. V. 8, Iss. 2, P. 767–789; DOI: 10.1007/s41808-022-00175-8

7. *Walker C.* Some results based on maximal regularity regarding population models with age and spatial structure // *J. Elliptic and Parabolic Equations*. 2018. V. 4, Iss. 1. P. 69–105;
DOI: 10.1007/s41808-018-0010-9
8. *Webb G.F.* Population Models Structured by Age, Size, and Spatial Position. In «Structured population models in biology and epidemiology». P. 1–49. Berlin: Springer-Verl., 2008.
9. *Треногин В.А.* Функциональный анализ. Москва: ФИЗМАТЛИТ, 2016.
10. *Makarov B., Podkorytov A.* Real Analysis: Measures, Integrals and Applications. London: Springer Science & Business Media, 2013.
11. *Benoit P.* Parabolic Equations in Biology. Springer Internat. Publ. Switzerland, 2015;
DOI: 10.1007/978-3-319-19500-1

UDC 517.95

**WEAK SOLVABILITY NEUMANN PROBLEM FOR A GLOBAL
IN TIME PARABOLIC EQUATION**

© 2025 F. A. Abdukarimov

*Lavrentyev Institute of Hydrodynamics SB RAS,
Prosp. Akad. Lavrentieva, 15, Novosibirsk 630090, Russia*

E-mail: abdukarimovfarhod8@gmail.com

Received 11.07.2024, revised 23.06.2025, accepted 17.09.2025

Abstract. The weak solvability of the Neumann problem for a global in time parabolic equation is proven. The globality means that there is a coefficient in the equation that depends on the integral of the solution over the entire time interval where the problem is being solved. The Galerkin method is used to prove the solvability. Besides, it is shown that the problem with the homogeneous Neumann conditions can have several solutions independent of the spatial variables.

Keywords: global in time parabolic equation, Neumann problem, solvability, Galerkin method, non-uniqueness.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2025.28.301

REFERENCES

1. Starovoitov V.N, Starovoitova B.N. Modeling the dynamics of polymer chains in water solution. Application to sensor design. *J. Physics: Conf. Ser.*, 2017, Vol. 894, Article 012088; DOI: 10.1088/1742-6596/894/1/012088
2. Starovoitov V.N. Initial boundary value problem for a nonlocal in time parabolic equation *Siberian. Electronic Math. Reports*, 2018, Vol. 15, pp. 1311–1319; DOI: 10.17377/semi.2018.15.107
3. Starovoitov V.N. Boundary value problem for a global-in-time parabolic equation. *Math. Meth. Appl. Sci.*, 2021, Vol. 44, Iss. 1, pp. 1118–1126; DOI: 10.1002/mma.6816
4. Starovoitov V.N. Weak solvability of a boundary value problem for a parabolic equation with a global-in-time term that contains a weighted integral. *J. Elliptic and Parabolic Equ.*, 2021, Vol. 7, Iss. 2, pp. 623–634; DOI: 10.1007/s41808-021-00103-2
5. Starovoitov V.N. Razreshimost' kraevoy zadachi o haotichnoy dinamike polimernoy molekuly v sluchae ogranichennogo potentsiala vzaimodejstviya [Solvability of the boundary value problem of chaotic dynamics of a polymer molecule in the case of a bounded interaction potential]. *Sib. Elektron. Mat. Izv.*, 2021, Vol. 18, No. 2, pp. 1714–1719 (in Russian); DOI: 10.33048/semi.2081.18.131
6. Djida J.-D., Foghem Gounoue G.F., Tchaptchie Y.K. Nonlocal complement value problem for a global in time parabolic equation. *J. Elliptic and Parabolic Equ.*, 2022, Vol. 8, Iss. 2, pp. 767–789; DOI: 10.1007/s41808-022-00175-8
7. Walker C. Some results based on maximal regularity regarding population models with age and spatial structure. *J. Elliptic and Parabolic Equ.*, 2018, Vol. 4, Iss. 1, pp. 69–105; DOI: 10.1007/s41808-018-0010-9
8. Webb G.F. Population Models Structured by Age, Size, and Spatial Position. In «Structured population models in biology and epidemiology», pp. 1–49. Berlin: Springer-Verl., 2008.
9. Trenogin V.A. Funkcional'nyj analiz [Functional analysis]. Moscow: FIZMATLIT, 2016.

10. Makarov B, Podkorytov A. Real Analysis: Measures, Integrals and Applications. London: Springer Science & Business Media; 2013.
11. Benoit P. Parabolic Equations in Biology. Springer Internat. Publ. Switzerland, 2015;
DOI: 10.1007/978-3-319-19500-1

УДК 519.6:004.4

О ПРИБЛИЖЁННОМ РЕШЕНИИ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ ОПТИМАЛЬНОГО БЫСТРОДЕЙСТВИЯ

© 2025 Е. В. Антипина^a, С. А. Мустафина^b, А. Ф. Антипин^c

*Уфимский университет науки и технологий,
ул. Заки Валиди, 32, г. Уфа 450076, Россия*

E-mails: ^astepashinaev@ya.ru, ^bmustafinasa@mail.ru, ^candrejantipin@ya.ru

Поступила в редакцию 29.09.2024 г.; после доработки 07.11.2025 г.;
принята к публикации 07.11.2025 г.

Предложен подход к поиску приближенного решения нелинейной задачи оптимального быстродействия на основе генетических алгоритмов. Применение генетических алгоритмов подразумевает конечномерную аппроксимацию исходной задачи и поиск управляющих параметров в классе кусочно-постоянных функций. Преимуществами предложенного подхода являются отсутствие необходимости применения дополнительных методов и преобразований задачи, возможность применения для решения многоэкстремальных задач, а также отсутствие требований к виду уравнений модели процесса. Для решения конечномерной задачи приведен модифицированный генетический алгоритм с вещественным кодированием. Работа алгоритма апробирована на примерах нелинейных задач оптимального быстродействия. Проведено сравнение полученных результатов решения задач с результатами применения других методов.

Ключевые слова: задача оптимального быстродействия, нелинейные управляемые системы, конечномерная аппроксимация, генетические алгоритмы, эволюционные методы.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2025.28.302

ВВЕДЕНИЕ

Одной из важных задач оптимального управления динамической системой, часто возникающей на практике, является задача оптимального быстродействия, заключающаяся в поиске управления, переводящего систему из начального состояния в заданное конечное состояние за минимальное время. Методам решения линейных задач быстродействия посвящено большое количество работ (например, [1]–[4]). Однако большинство сложных процессов управления (например, в робототехнике, химической технологии, навигации и др.) обладает свойством нелинейности [5].

Одним из подходов к решению нелинейных задач быстродействия является применение принципа максимума Понтрягина, обеспечивающего высокую точность вычислений [6, 7]. Недостатком использования данного метода при решении практических задач является определения начальных условий для решения сопряжённой системы, с помощью которой формулируются необходимые условия оптимальности, с учётом предметной области решаемой задачи.

В работе [8] представлен итерационный метод решения нелинейной задачи оптимального быстродействия с аддитивным управлением, основанный на построении последовательностей смежных симплексов с вершинами на границах областей достижимости. Метод применим для решения класса задач, в которых система дифференциальных уравнений, описывающая динамику процесса, линейна по управлению, а также разделена по состоянию и управлению. Применение метода для задач с нелинейным входом управления невозможно.

В работе [9] предложен метод определения оптимального по быстродействию управления для систем, в которых можно выделить линейное вхождение фазовых переменных и управления. Для систем с нелинейным управлением и нелинейным вхождением переменных состояния метод неприменим.

Исследование нелинейной задачи быстродействия приведено в статье [10], где доказываются достаточные условия существования оптимального управления и проанализированы его точки переключения. При этом управляемая система должна удовлетворять условию гладкости.

Рассмотренные методы решения нелинейных задач быстродействия применимы при дополнительных условиях, накладываемых на вид системы дифференциальных уравнений, описывающую динамику процесса (линейное вхождение управления, линейное вхождение переменных состояния процесса, условие гладкости и др.). В связи с этим актуальной является разработка методов и алгоритмов решения нелинейных задач быстродействия общего вида, без дополнительных ограничений, накладываемых на математическое описание процесса.

Оптимизация нелинейных динамических систем с помощью аналитических методов является трудоёмким процессом. Часто на практике достаточно получить приближённое решение задачи оптимального управления. Поэтому при исследовании нелинейных систем часто применяется метод конечномерной аппроксимации задачи управления, сводящей исходную задачу бесконечномерной оптимизации к задаче математического программирования.

При решении конечномерных задач большинство методов оптимизации эффективно отыскивают оптимум при удачно выбранном начальном приближении, а также применяются только для гладких и выпуклых задач (например, градиентные методы [11]). Нелинейная задача быстродействия может иметь невыпуклую область достижимости и, как следствие, локальные экстремумы, что создаёт дополнительные трудности в разработке процедуры поиска решения.

Одним из способов решения оптимизационных задач является применение методов эволюционного моделирования. К ним относятся генетические алгоритмы (ГА), широко применяющиеся для решения различных задач оптимизации, когда традиционные методы могут быть неэффективны [12, 13]. Преимуществами генетических алгоритмов являются отсутствие необходимости вычисления градиента целевой функции, применимость к негладким или невыпуклым областям поиска.

Исследования, посвящённые разработке генетических алгоритмов, направлены, в основном, для решения задач оптимизации в различных областях (например, [14]–[16]). Значительно меньше работ посвящено применению генетических алгоритмов для решения задач оптимального управления. В работе [17] приведён генетический алгоритм для решения задачи оптимального управления со свободным правым концом траектории. В работе [18] рассматривается решение задачи оптимального управления для случая линейного вхождения управления на основе принципа максимума Понтрягина и генетического алгоритма. В статье [19] показано решение задачи оптимального управления с закреплённым правым концом траектории с помощью генетического алгоритма и метода штрафов. Однако применение сторонних методов требует дополнительных аналитических выводов (например, сопряжённой системы), либо введения новых параметров (например, параметр штрафа), значения которых необходимо подбирать для конкретной задачи.

Целью работы является разработка генетического алгоритма для определения приближённого решения нелинейной задачи оптимального быстродействия. Новизна предлагаемого авторами подхода заключается в следующем:

- 1) алгоритм не требует использования дополнительных методов и преобразований исходной задачи;
- 2) алгоритм не предъявляет требования к виду уравнений модели процесса и применим к процессам, описываемым системами нелинейных дифференциальных уравнений общего вида.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть управляемый процесс описывается нелинейной системой обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\dot{x} = f(x(t), u(t), t), \quad t \in [0, T], \quad (1)$$

где $x \in R^n$ — вектор фазового состояния, $u(t) \in R^s$ — вектор управляющих воздействий, компоненты которого удовлетворяют ограничениям

$$\underline{u}_j(t) \leq u_j(t) \leq \bar{u}_j(t), \quad j = \overline{1, s}, \quad (2)$$

$f(x(t), u(t), t)$ — вектор-функция, непрерывная вместе со своими частными производными.

Заданы начальное и конечное состояния управляемого процесса:

$$x(0) = x^0, \quad x(T) = x^1.$$

Требуется найти допустимое управление $u(t)$, $t \in [0, T]$, переводящее систему (1) из начального состояния x^0 в конечное состояние x^1 за минимальное время T^* , т. е. необходимо минимизировать целевой функционал:

$$J(u) = T \rightarrow \min. \quad (3)$$

Для перехода к конечномерной задаче разобьём отрезок $[0, T]$ на части точками t_0, t_1, \dots, t_r с шагом $h = \frac{T}{r}$ так, что $0 = t_0 < t_1 < \dots < t_r = T$. В данных узлах будем искать значения управляющих функций $u_j(t)$, $j = \overline{1, s}$, а для получения их промежуточных значений применим кусочно-постоянную аппроксимацию

$$u_j(t) = u_j(t_k) = u_{jk}, \quad t \in [t_k, t_{k+1}], \quad k = \overline{0, r-1}.$$

Ограничения (2) преобразуются к виду

$$\underline{u}_{jk} \leq u_{jk} \leq \bar{u}_{jk}, \quad \underline{u}_{jk} = \underline{u}_j(t_k), \quad \bar{u}_{jk} = \bar{u}_j(t_k), \quad j = \overline{1, s}, \quad k = \overline{0, r-1}.$$

Целевой функционал примет вид:

$$J(u) = t_r \rightarrow \min.$$

Система дифференциальных уравнений (1) заменяется разностными уравнениями с помощью какого-либо численного метода (Эйлера, Рунге — Кутта и др.)

2. ГЕНЕТИЧЕСКИЙ АЛГОРИТМ ПОИСКА РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ БЫСТРОДЕЙСТВИЯ

Для решения конечномерной задачи оптимального быстрогодействия сформулируем генетический алгоритм с вещественным кодированием. Итерационная работа классического генетического алгоритма включает в себя процедуру смены поколений особей, которые являются потенциальными решениями оптимизационной задачи, и применения к ним операций отбора (селекции), скрещивания (кроссовера) и мутации. Функцией приспособленности, определяющей пригодность особи в качестве решения задачи, является целевая функция. В качестве критерия останова обычно рассматривается достижение максимального количества итераций.

Модифицируем генетический алгоритм с вещественным кодированием применительно для решения задачи оптимального быстрогодействия. Время T одновременно является управляющим параметром и входит в выражение целевого функционала. Будем рассматривать его

только в качестве управления. Пусть $P = (p_1, p_2, \dots, p_s, p_{s+1})^T$ — особь, являющаяся возможным решением задачи быстрогодействия, элементы которой соответствуют продолжительности функционирования системы (1) и значениям управляющих функций $u_j(t)$, $j = \overline{1, s}$, в дискретные моменты времени

$$p_j = \begin{cases} (p_{j0}, p_{j1}, \dots, p_{jr-1}) = (u_{j0}, u_{j1}, \dots, u_{jr-1}), & j = \overline{1, s}, \\ T, & j = s + 1. \end{cases} \quad (4)$$

Набор из q таких особей P^l , $l = \overline{1, q}$, образует популяцию.

Обозначим за \tilde{x}^1 вектор фазовых координат, вычисленный для особи P в конечный момент времени p_{s+1} . Функцию приспособленности зададим в виде расстояния между вектором \tilde{x}^1 и заданным вектором конечного состояния процесса x^1 :

$$G(P) = \sqrt{\sum_{i=1}^n (\tilde{x}_i^1 - x_i^1)^2} \rightarrow \min. \quad (5)$$

Чем меньше значение $G(P)$, тем особь более приспособленная. Чтобы вычислить значение функции приспособленности (5) для особи P^l , необходимо найти численное решение системы дифференциальных уравнений (1) на промежутке времени $[0, p_{s+1}^l]$ для кусочно-постоянного управления с узлами $(p_{j0}^l, p_{j1}^l, \dots, p_{jr-1}^l)$, $j = \overline{1, s}$.

В качестве условия окончания поиска примем не фиксированное количество итераций смены популяции, а выполнение неравенства

$$G(P) < \varepsilon, \quad (6)$$

где ε — заданный пользователем параметр.

Поскольку условие (6) может быть выполнено при разных наборах управляющих параметров, то будем запоминать возможные решения в специальный массив **best**. Возможные решения можно потерять на этапе мутации, поскольку в следующее поколение переходит одна из случайно выбранных особей-мутантов. Поэтому на этапе мутации дополнительно будем проводить проверку выполнения условия (6). В конце работы алгоритма из особей массива **best**, удовлетворяющих неравенству (6), в качестве решения выберем ту особь, у которой ген-время принимает наименьшее значение.

Генетический алгоритм для поиска приближённого решения задачи оптимального быстрогодействия состоит из следующих шагов.

Шаг 1. Задать параметры алгоритма: q — количество особей в популяции, r — количество точек разбиения временного интервала, \overline{T} — максимальное значение времени процесса управления, ε — параметр окончания поиска.

Заменить систему дифференциальных уравнений (1) разностным аналогом с помощью одного из численных методов.

Шаг 2. Создать начальную популяцию управляющих параметров P^l , $l = \overline{1, q}$. Элементы p_{jk}^l для $j = \overline{1, s}$ вычислить по формуле

$$p_{jk}^l = \underline{u}_{jk} + \alpha_{jk}(\overline{u}_{jk} - \underline{u}_{jk}),$$

где $\alpha_{jk} \in [0, 1]$ — случайное число, $k = \overline{0, r-1}$.

Гену p_{s+1}^l присвоить случайное значение из отрезка $[0, \overline{T}]$.

Шаг 3. Для каждой особи начальной популяции P^l , $l = \overline{1, q}$, рассчитать шаг разбиения интервала времени $[0, p_{s+1}^l]$ по формуле $h = p_{s+1}^l / r$ и приспособленность $G(P^l)$. Особи, для которых выполнено условие (6), поместить в массив **best**.

Шаг 4. Выполнить операцию селекции. Из текущей популяции выбрать две особи P^a и P^b с помощью турнирного отбора: в первом турнире случайным образом выбираются две различные особи, из которых случайным образом во втором турнире отбирается одна особь.

Шаг 5. Выполнить операцию скрещивания. Сформировать две особи-потомка с помощью арифметического кроссовера:

$$\text{Potomok}^1 = \lambda P^a + (1 - \lambda)P^b, \quad \text{Potomok}^2 = \lambda P^b + (1 - \lambda)P^a,$$

где $\lambda \in (0, 1)$ — случайное число.

Шаг 6. Выполнить операцию мутации. Случайным образом выбрать ген каждого из потомков. Если ген соответствует управлению u_{jk} , то заменить его случайным значением из промежутка $[\underline{u}_{jk}, \bar{u}_{jk}]$. Если ген соответствует значению времени T , то заменить его случайным значением из промежутка $[0, \bar{T}]$.

Шаг 7. Вычислить приспособленность каждой особи, полученной на этапе мутации.

Шаг 8. Для каждой особи-мутанта проверить условие (6). Если оно выполнено, то поместить особь-мутанта в массив **best**.

Шаг 9. Из текущей популяции выбрать наименее приспособленную особь и заменить её случайно выбранным мутантом.

Шаг 10. Проверить условие окончания расчётов. Если условие (6) выполнено, то перейти на шаг 11, иначе перейти на шаг 4.

Шаг 11. В массиве **best** найти особь, у которой ген p_{s+1} принимает наименьшее значение. Приближённым решением задачи оптимального быстрогодействия является значение p_{s+1} , которое соответствует наименьшему времени окончания процесса T^* , а остальные элементы особи соответствуют значениям управляющих функций $u_j(t)$ в дискретные моменты времени согласно формуле (4).

Таким образом, в классический генетический алгоритм с вещественным кодированием авторами внесены следующие модификации:

- 1) специальная структура особи, включающая в себя дискретные значения управляющих параметров и времени;
- 2) в качестве приспособленности особей рассматривается не целевой функционал в форме (3), а отклонение между заданным конечным состоянием процесса и вычисленным с помощью алгоритма;
- 3) введён специальный массив **best** для хранения решений, удовлетворяющих условию (6), из которых впоследствии выбирается решение с наименьшим значением времени;
- 4) условием окончания расчётов является не максимальное количество поколений популяции, а отклонение от терминального состояния управляемого процесса.

3. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Для проведения численных экспериментов сформулированный алгоритм реализован в среде визуального программирования Delphi. Для решения системы дифференциальных уравнений применён метод Рунге — Кутты четвёртого порядка.

Задача оптимального быстрогодействия с невыпуклой областью достижимости

Рассмотрим задачу оптимального управления колебательным движением маятника, которая содержит локальные экстремумы ввиду невыпуклой области достижимости.

Математическая модель колебательного движения маятника представляется системой дифференциальных уравнений [20]:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_2, \\ \dot{x}_2 &= u - \sin(x_1). \end{aligned} \quad (7)$$

На управление $u(t)$ наложены ограничения

$$-1 \leq u(t) \leq 1, \quad t \in [0, T]. \quad (8)$$

Начальное и конечное состояния заданы значениями:

$$x_1(0) = 5, \quad x_2(0) = 0, \quad (9)$$

$$x_1(T) = 12, \quad x_2(T) = 1. \quad (10)$$

Целевой функционал задан в форме (3).

Требуется определить управление $u(t)$ из области допустимого управления, задаваемой неравенствами (8), которое переводит систему (7) из состояния (9) в состояние (10) за наименьшее время.

Генетический алгоритм применён со следующими параметрами: количество точек разбиения интервала времени $r = 50$, максимальное значение времени $\bar{T} = 10$, размер популяции $q = 50$, параметр окончания вычислений $\varepsilon = 10^{-2}$. В качестве значений параметров алгоритма выбран набор, при котором достигается наименьшее значение целевого функционала при наименьшем времени вычислений. Данный набор параметров был получен в результате проведения ряда вычислительных экспериментов, проводимых с использованием разработанного программного обеспечения. Фиксировался размер популяции, равный 20, 50 и 80 особей, точность 0,01 и 0,001, количество точек r , равное 50 и 100; изменение значения параметра \bar{T} не оказывает существенное влияние на время расчётов.

Функция приспособленности имеет вид: $G(P) = \sqrt{(\tilde{x}_1(T) - 12)^2 + (\tilde{x}_2(T) - 1)^2}$.

В результате получено управление

$$u(t) = \begin{cases} 1, & t \in [0, 2.5], \\ -1, & t \in (2.5, 4.99], \end{cases} \quad (11)$$

которому соответствуют значения фазовых переменных, показанных на рис. 1.

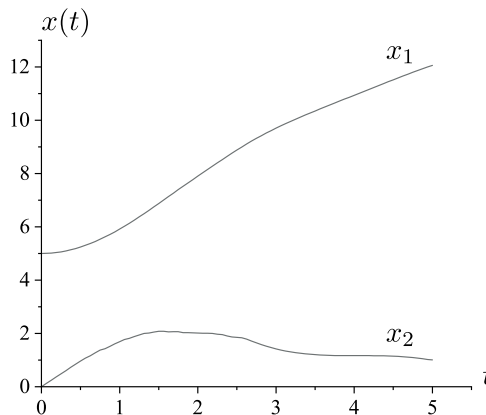


Рис. 1. Динамика фазовых переменных

Наименьшее время процесса управления составило $T^* = 4.99$, отклонение от терминальных условий равно 0.008.

Решение задачи (7)–(10) получено также с помощью метода вариаций в пространстве управлений. Для этого произведён поиск решения терминальных задач на отрезке $[0, \bar{T}]$, где \bar{T} уточнялось методом дихотомии. Задача решена с шагом 0.1 по управлению, количеством точек разбиения интервала времени, равным 50, и начальным приближением $u^0(t) = 0$, $T^0 = 10$. Получено $T^* = 5$, а управление по структуре сопоставимо с (11).

Однако, при начальном приближении $u^0(t) = 1$, $T^0 = 1$ метод локальных вариаций попал в локальный оптимум. Наименьшее время процесса $T^* = 5.53$, при этом управляющая функция имеет вид:

$$u(t) = \begin{cases} 1, & t \in [0, 3.2], \\ -1, & t \in (3.2, 5.53], \end{cases}$$

отклонение от терминальных условий равно 0.0094.

Работа генетического алгоритма протестирована для решения задачи (7)–(10) при разных начальных приближениях. На шаге 2 алгоритма значения оптимизируемых параметров заполнялась фиксированными значениями:

$$p_{1k}^l = u^0, \quad p_2^l = T^0, \quad l = \overline{1, q}, \quad k = \overline{0, r-1}.$$

В табл. 1 показано значение наименьшего времени T^* при различных начальных приближениях $u^0(t)$ и T^0 . Из таблицы видно, что при разных начальных значениях искомых параметров происходит несущественное изменение наименьшего времени T^* , но количество итераций его поиска различно.

Таблица 1

Значения наименьшего времени в задаче (7)–(10) при разных начальных приближениях

$u^0(t)$	T^0	Количество итераций	T^*
1	1	2876	4,993
-1	1	2615	4,998
1	10	3263	5,011
-1	10	3377	4,991
0	10	3285	5,018
0	1	2922	4,997

Из приведенного примера видно, что генетический алгоритм эффективнее ищет решение задачи быстрогодействия с невыпуклой областью достижимости, по сравнению с методом вариаций в пространстве управлений.

Задача оптимального управления химическим процессом

Применим генетический алгоритм поиска решения задачи быстрогодействия для процесса получения фталевого ангидрида, математическая модель которого содержит экспоненциальную зависимость кинетических констант от управления.

Динамика состояния процесса получения фталевого ангидрида описывается системой дифференциальных уравнений [21]:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= -k_1(u)x_1 - k_3(u)x_1 - k_4(u)x_1, \\ \dot{x}_2 &= k_1(u)x_1 - k_2(u)x_2 - k_5(u)x_2, \\ \dot{x}_3 &= k_3(u)x_1 + k_5(u)x_2 - k_6(u)x_3, \\ \dot{x}_3 &= k_2(u)x_2 + k_4(u)x_1, \\ \dot{x}_3 &= k_6(u)x_3, \end{aligned} \tag{12}$$

где $x = (x_1, x_2, \dots, x_5)$ — вектор концентраций веществ (моль/л), $t \in [0, T]$ — время протекания реакции (ч), u — температура реакции (К), $k_j(u)$ — константа скорости j -й стадии (1/ч, $j = \overline{1, 6}$), зависящая от температуры u , исходя из уравнения Аррениуса

$$k_j(u) = k_{0j} e^{-E_j/Ru},$$

где k_{0j} — предэкспоненциальный множитель (1/ч), E_j — энергии активации j -й стадии (Дж/моль), R — универсальная газовая постоянная (8.31 Дж/(моль·К)).

Численные значения кинетических параметров реакции синтеза фталевого ангидрида приведены в работе [21].

Начальные концентрации веществ заданы следующими значениями (моль/л):

$$x_1(0) = 1, \quad x_i(0) = 0, \quad i = \overline{2, 5}. \quad (13)$$

На значения параметра управления наложены ограничения:

$$620\text{K} \leq u(t) \leq 644\text{K}, \quad t \in [0, T]. \quad (14)$$

Рассмотрим задачу быстродействия для процесса синтеза фталевого ангидрида, в которой задана концентрация промежуточного вещества x_2 в конце реакции, равная 0.28 моль/л:

$$x_2(T) = 0.28. \quad (15)$$

Параметры генетического алгоритма заданы значениями: $r = 50$, $\bar{T} = 5$, $q = 50$, $\varepsilon = 10^{-2}$. Приспособленность особей определяется по формуле

$$G(P) = \sqrt{(\tilde{x}_2(T) - 0.28)^2}.$$

Наименьшее время протекания процесса составило 0.18 ч, при этом концентрация промежуточного вещества $x_2(T^*) = 0.277$ моль/л. Управление $u(t)$ имеет вид

$$u(t) = \begin{cases} 620, & t \in [0, 0.08], \\ 1200t + 524, & t \in (0.08, 0.1], \\ 644, & t \in (0.1, 0.18]. \end{cases}$$

Изменение концентраций веществ во времени, соответствующее вычисленному управлению, показано на рис. 2.

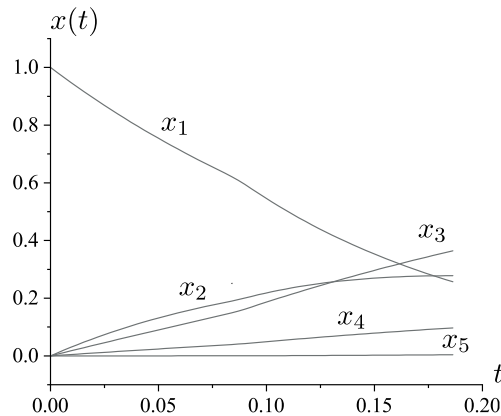


Рис. 2. Динамика концентраций веществ

Проведено сравнение разработанного генетического алгоритма с генетическим алгоритмом без модификации. Параметры алгоритма заданы теми же значениями, которые применялись при решении задачи модифицированным генетическим алгоритмом. Возможные решения на этапе мутации не запоминались, а первая особь, удовлетворяющее условию (6), принималась в качестве приближённого решения задачи (12)–(15). Оцениваемые показатели эффективности применения алгоритмов и их полученные значения приведены в табл. 2. Значения показателей оценивалось по результатам 20 запусков каждого их алгоритмов при разных значениях точности ε . Надёжность определялась как отношение количества успешных запусков алгоритма, в которых достигалось лучшее значение T^* , к общему количеству запусков.

Таблица 2

Результаты тестирования генетических алгоритмов

Алгоритм	Лучшее значение T^*	Среднее значение T^*	Надёжность	Число итераций
$\varepsilon = 10^{-1}$				
ГА без модификации	0.238	0.241	0.80	2028
Модифицированный ГА	0.188	0.190	0.85	2011
$\varepsilon = 10^{-2}$				
ГА без модификации	0.193	0.196	0.90	4193
Модифицированный ГА	0.180	0.182	0.95	3626
$\varepsilon = 10^{-3}$				
ГА без модификации	0.188	0.190	0.95	5482
Модифицированный ГА	0.180	0.181	0.95	4578

Из табл. 2 видно, что при низкой точности вычислений ($\varepsilon = 10^{-1}$) количество итераций, за которое найдено решение обоими алгоритмами, отличается незначительно при небольшой разнице в уровне надёжности. При этом значение T^* , рассчитанное с помощью модифицированного алгоритма меньше, по сравнению с алгоритмом без модификации. С увеличением значения параметра ε наименьшее время T^* , найденное обоими методами, практически сравнивается, однако увеличивается время вычисления решения с помощью алгоритма без модификации. Поэтому можно сделать вывод, что при небольшой точности вычислений время работы алгоритмов примерно одинаковое, но лучшее значение T^* вычисляет модифицированный алгоритм. Для получения более точного решения модифицированному алгоритму требуется меньше времени, по сравнению с алгоритмом без модификации.

Задача об ориентации летательного аппарата

Рассмотрим задачу управления положением летательного аппарата, описываемым системой дифференциальных уравнений [22]:

$$\begin{aligned}
 \dot{x}_1 &= x_3, \\
 \dot{x}_2 &= x_4, \\
 \dot{x}_3 &= -x_4 + u_1 \sin(u_2), \\
 \dot{x}_4 &= x_3 + u_1 \cos(u_2),
 \end{aligned} \tag{16}$$

где $x_1(t)$, $x_2(t)$, $x_3(t)$, $x_4(t)$ — переменные, определяющие фазовое состояние объекта управления, $u_1(t)$, $u_2(t)$ — управляющие параметры, на которые наложены ограничения

$$0 \leq u_1(t) \leq 1, \quad -\pi \leq u_2(t) \leq \pi, \quad t \in [0, T]. \tag{17}$$

Пусть задано начальное и конечное положение летательного аппарата:

$$x_1(0) = 10, \quad x_2(0) = 10, \quad x_3(0) = 0, \quad x_4(0) = 0, \quad (18)$$

$$x_1(T) = 0, \quad x_2(T) = 0, \quad x_3(T) = 0, \quad x_4(T) = 0. \quad (19)$$

Требуется найти значения управляющих параметров $u_1(t)$, $u_2(t)$, удовлетворяющие условиям (17) и переводящие летательный аппарат, описываемый системой (16), из положения (18) в положение (19) за минимальное время T^* .

Приближённое решение задачи (16)–(19) получено с функцией приспособленности

$$G(P) = \sqrt{\tilde{x}_1^2(T) + \tilde{x}_2^2(T) + \tilde{x}_3^2(T) + \tilde{x}_4^2(T)}$$

и со следующими параметрами алгоритма: $r = 50$, $q = 50$, $\bar{T} = 15$, $\varepsilon = 10^{-2}$.

На рис. 3 приведены результаты расчётов с помощью генетического алгоритма.

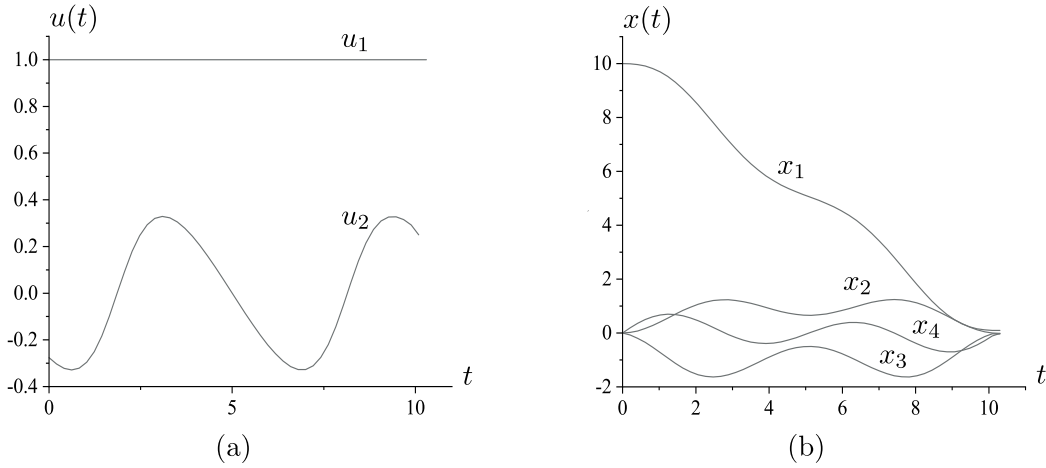


Рис. 3. Приближённое решение задачи (16)–(19):
(а) управляющие функции; (б) фазовые переменные

В результате вычислений получено наименьшее время T , равное 10.3, что на 0.2% превышает его значение, рассчитанного в работе [22] с помощью метода неподвижных точек. Также в работе [22] отмечено, что метод неподвижных точек не сходится к решению задачи при начальном приближении $T^0 = 1$, $u_1^0(t) = 0.5$, $u_2^0(t) = 0.5$. Чтобы проверить эффективность работы генетического алгоритма, было найдено решение задачи быстродействия (16)–(19) при указанных начальных значениях искомых параметров. Для этого начальная популяция на шаге 2 формировалась не случайным образом из области, задаваемой неравенствами (17), и отрезка $[0, \bar{T}]$, а заполнялась фиксированными значениями $p_{jk}^l = 0.5$, $p_{s+1}^l = 1$, $l = \overline{1, q}$, $k = \overline{0, r-1}$, $j = 1, 2$. На рис. 4 показана зависимость управляющих параметров от номера итерации. Из рисунка видно, что значение управляющего параметра u_1 стабилизируется вблизи решения после 2000 итераций, u_2 — после 5000 итераций.

Приведенный пример показывает, что разработанный алгоритм позволяет преодолеть попадание в локальный экстремум и найти приближенное решение задачи.

Таким образом, результаты численных экспериментов подтверждают способность разработанного алгоритма преодолевать локальные минимумы при решении нелинейных задач оптимального быстродействия, что свидетельствует о его эффективности.

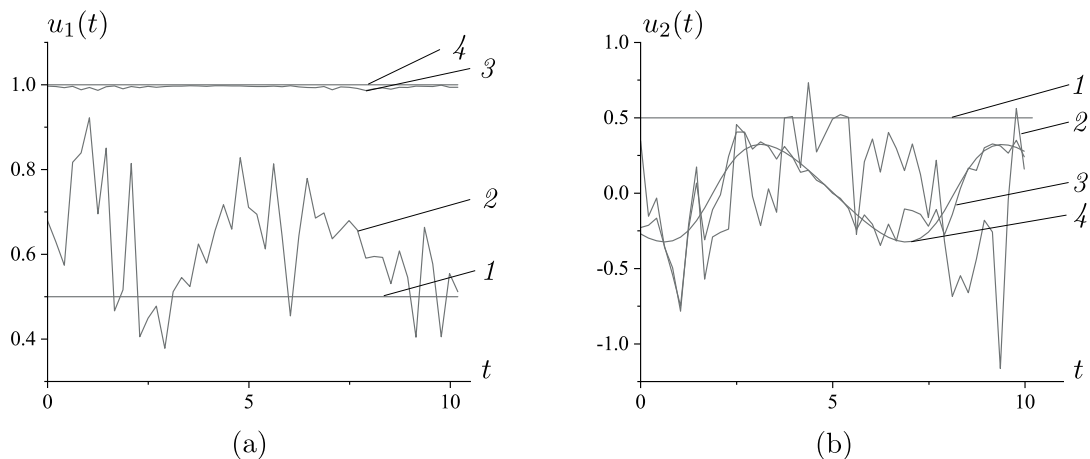


Рис. 4. Итеративное изменение параметров управления u_1 , u_2 :

- (a) 1 — начальное приближение; 2 — после 50 итераций;
3 — после 500 итераций; 4 — после 2000 итераций;
(b) 1 — начальное приближение; 2 — после 50 итераций;
3 — после 2000 итераций; 4 — после 5000 итераций

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработанный генетический алгоритм позволяет найти приближенное решение нелинейной задачи оптимального быстрогодействия. Особенности алгоритма являются специальная структура особи, включающая в себя дискретные значения управляющих параметров и времени, и дополнительный массив, предназначенный для хранения потенциальных решений. В качестве функции приспособленности и условием завершения расчетов задано отклонение от терминальных условий. Алгоритм применим для решения нелинейных задач быстрогодействия общего вида, и для его использования не требуется применять дополнительные методы и преобразований задачи.

Проведены вычислительные эксперименты по решению задач оптимального быстрогодействия. Сравнение найденных решений с решениями, рассчитанными с помощью других методов, продемонстрировало эффективность применения разработанного алгоритма.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FZWU-2023-0002). 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. Тятюшкин А.И. Численные методы расчёта оптимального по быстродействию управления // Изв. Иркутск. гос. ун-та. Сер. Математика. 2003. Т. 8. С. 164–177.
2. Шевченко Г.В. Численный алгоритм решения линейной задачи оптимального быстрогодействия // Журн. вычисл. математики и матем. физики. 1991. Т. 31, № 12. С. 1763–1771.

3. *Флоринский В.В.* Решение линейной задачи быстродействия с двумерным управлением // Научн. ведомости Белгород. гос. ун-та. Сер. Математика. Физика. 2015. № 5, Вып. 38. С. 89–95.
4. *Новиков Д.А.* О простейшей задаче быстродействия с фазовым ограничением при управлении пространственной ориентацией тела // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. 2023. Т. 29, № 3. С. 62–72; DOI: 10.21538/0134-4889-2023-29-3-62-72
5. *Павлюковец С.А., Вельченко А.А., Радкевич А.А.* Математическая модель системы управления мобильным гусеничным роботом с учётом кинематических и динамических параметров // Системный анализ и прикладная информатика. 2023. № 3. С. 33–38; DOI: 10.21122/2309-4923-2023-3-33-38
6. *Понтрягин Л.С., Болтянский В.Г., Гамкрелидзе Р.В., Мищенко Е.Ф.* Математическая теория оптимальных процессов. М.: Наука, 1983.
7. *Карамзин Д.Ю.* Принцип максимума Понтрягина для задачи оптимального управления с фазовыми ограничениями при ослабленных предположениях управляемости // Вопросы теории безопасности и устойчивости систем. 2018. № 20. С. 46–61.
8. *Шевченко Г.В.* Метод численного решения нелинейной задачи оптимального быстродействия с аддитивным управлением // Журн. вычисл. математики и матем. физики. 2007. Т. 47, № 11. С. 1843–1854.
9. *Александров В.М.* Итерационный метод вычисления оптимального по быстродействию управления квазилинейными системами // Сиб. журн. вычисл. математики. 2003. Т. 6, № 3. С. 227–247.
10. *Topunov M.V.* A Nonlinear Time Optimal Control Problem // Automation and Remote Control. 2002. V. 63, N 7. P. 1062–1069.
11. *Срочко В.А.* Модернизация методов градиентного типа в задачах оптимального управления // Изв. вузов. Математика. 2002. № 12. С. 66–78.
12. *Katoch S., Chauhan S.S., Kumar V.* A Review on Genetic Algorithm: Past, Present, and Future // Multimedia Tools and Applications. 2021. V. 80. P. 8091–8126; DOI: 10.1007/s11042-020-10139-6
13. *Трокоз Д.А.* Метод параметрической оптимизации для широких нейронных сетей с использованием генетических алгоритмов // Изв. Самарского научного центра РАН. 2021. Т. 23, № 2. С. 51–56; DOI: 10.37313/1990-5378-2021-23-2-51-56
14. *Kozuch D.J., Stillinger F.H., Debenedetti P.G.* Genetic Algorithm Approach for the Optimization of Protein Antifreeze Activity Using Molecular Simulations // J. Chemical Theory Comput. 2020. V. 16, N 12. P. 7866–7873; DOI: 10.1021/acs.jctc.0c00773
15. *Jalali Z., Noorzai E., Heidari S.* Design and optimization of form and facade of an office building using the genetic algorithm // Sci. Technol. Built Environment. 2020. V. 26, N 2. P. 128–140; DOI: 10.1080/23744731.2019.1624095
16. *Migov D.A., Volzhankina K.A., Rodionov A.S.* Genetic Algorithms for Drain Placement in Wireless Sensor Networks Optimal by the Reliability Criterion // Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing. 2021. V. 57, N 3. P. 240–249; DOI: 10.3103/S8756699021030110
17. *Пантелеев А.В., Метлицкая Д.В.* Применение генетических алгоритмов с бинарным и вещественным кодированием для приближённого синтеза субоптимального управления детерминированными системами // Автоматика и телемеханика. 2011. № 11. С. 117–129.
18. *Дивеев А.И.* Решение задачи оптимального управления эволюционным алгоритмом на основе принципа максимума Понтрягина // Вопросы теории безопасности и устойчивости систем. 2018. № 20. С. 3–17.
19. *Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф.* Алгоритм поиска приближённого решения задачи оптимального управления химическим процессом при наличии терминальных ограничений // Вестн. Томск. гос. ун-та. Управление, вычислительная техника и информатика. 2022. № 59. С. 4–12; DOI: 10.17223/19988605/59/1
20. *Горнов А.Ю.* Вычислительные технологии решения задач оптимального управления. Новосибирск: Наука, 2009.
21. *Антипина Е.В., Мустафина С.А., Антипин А.Ф.* Программное обеспечение для автоматизации процесса поиска кинетических параметров химических реакций // Программные продукты и системы. 2020. № 1. С. 125–131.

22. Булдаев А.С. Методы неподвижных точек в задачах оптимизации управляемых систем // Итоги науки и техники, серия Современная математика и её приложения. Тематические обзоры. 2020. Т. 183. С. 22–34; DOI: 10.36535/0233-6723-2020-183-22-34

UDC 519.6:004.4

ON THE APPROXIMATE SOLUTION OF A NONLINEAR PROBLEM OF OPTIMAL PERFORMANCE

© 2025 E. V. Antipina^a, S. A. Mustafina^b, A. F. Antipin^c

*Ufa University of Science and Technology,
Ufa, 450076 Russia*

E-mails: ^astepashinaev@ya.ru, ^bmustafinasa@mail.ru, ^candrejantipin@ya.ru

Received 29.09.2024, revised 07.11.2025, accepted 07.11.2025

Abstract. The article proposes an approach to finding an approximate solution to a nonlinear problem of optimal performance based on genetic algorithms. The use of genetic algorithms implies a finite-dimensional approximation of the original problem and the search for control parameters in the class of piecewise constant functions. The advantages of the proposed approach are the lack of need to use additional methods and transformations of the problem, the possibility of using it to solve multi-extremal problems, the absence of requirements for the type of process model equations, and the independence of the solution from the initial approximation. A modified genetic algorithm with real coding is given for solving a finite-dimensional problem. The algorithm is tested on examples of nonlinear problems of optimal performance. The obtained results of solving the problems are compared with the results of using other methods. The independence of the calculated solution from the choice of the initial approximation is shown.

Keywords: optimal performance problem, nonlinear controlled systems, finite-dimensional approximation, genetic algorithms, evolutionary methods.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2025.28.302

REFERENCES

1. Tyatyushkin A.I. Chislennyye metody rascheta optimal'nogo po bystrodeistviyu upravleniya [Numerical methods for calculating speed-optimal control]. *Izv. Irkutsk. gos. un-ta. Ser. Matematika* [Izv. Irkutsk State University. Ser. Mathematics.], 2003, Vol. 8, pp. 164–177 (in Russian).
2. Shevchenko G.V. Chislennyi algoritm resheniya lineinoi zadachi optimal'nogo bystrodeistviya [Numerical algorithm for solving a linear problem of optimal performance]. *Zhurn. vychisl. matematiki i matem. fiziki* [J. Calculation. Mathematics Math. Physics.], 1991, Vol. 31, No. 12, pp. 1763–1771 (in Russian).
3. Florinskii V.V. Reshenie lineinoi zadachi bystrodeistviya s dvumernym upravleniem [Solution of a linear time-optimal problem with two-dimensional control]. *Nauchn. vedomosti Belgorod. gos. un-ta. Ser. Matematika. Fizika* [Sci. Vedomosti Belgorod State University. Ser. Mathematics. Physics], 2015, No. 5, pp. 89–95 (in Russian).
4. Novikov D.A. O prosteishei zadache bystrodeistviya s fazovym ogranicheniem pri upravlenii prostranstvennoi orientatsiei tela [On the simplest time-optimal problem with phase constraints in the control of the spatial orientation of a body]. *Trudy Instituta Matematiki i Mekhaniki UrO RAN* [Proceed. Institute of Mathematics and Mechanics, UB RAS], 2023, Vol. 29, No. 3, pp. 62–72 (in Russian); DOI: 10.21538/0134-4889-2023-29-3-62-72
5. Pauliukavets S.A., Velchenko A.A., Radkevich A.A. Matematicheskaya model' sistemy upravleniya mobil'nym gusenichnym robotom s uchetom kinematicheskikh i dinamicheskikh parametrov [Mathematical model of the control system of mobile caterpillar robot taking into account kinematic and

- dynamic parameters]. *Sistemnyi analiz i prikladnaya informatika* [Systems Anal. Appl. Comput. Sci.], 2023, No. 3, pp. 33–38 (in Russian); DOI: 10.21122/2309-4923-2023-3-33-38
6. Pontryagin L.S., Boltyanskii V.G., Gamkrelidze R.V., Mishchenko E.F. *Matematicheskaya teoriya optimal'nykh protsessov* [Mathematical theory of optimal processes]. Moscow: Nauka, 1983 (in Russian).
 7. Karamzin D.Yu. Printsip maksimuma Pontryagina dlya zadachi optimal'nogo upravleniya s fazovymi ogranicheniyami pri oslablennykh predpolozheniyakh upravlyaemosti [A Pontryagin maximum principle for state constrained optimal control problem under weakened controllability hypothesis]. *Voprosy teorii bezopasnosti i ustoychivosti sistem* [Issues of Security Theory and Stability of Systems], 2018, No. 20, pp. 46–61 (in Russian).
 8. Shevchenko G.V. Metod chislennogo resheniya nelineinoy zadachi optimal'nogo bystrodeistviya s additivnym upravleniem [Numerical method for solving a nonlinear time-optimal control problem with additive control]. *Zhurn. vychisl. matematiki i matem. fiziki* [J. Calculation. Mathematics Math. Physics], 2007, Vol. 47, No. 11, pp. 1843–1854 (in Russian).
 9. Aleksandrov V.M. Iteratsionnyi metod vychisleniya optimal'nogo po bystrodeistviyu upravleniya kvazilineinymi sistemami [An iterative method for computation of time-optimal control of quasilinear systems]. *Sib. zhurn. vychisl. matematiki* [Sib. J. Calculation. Mathematics], 2003, Vol. 6, No. 3, pp. 227–247 (in Russian).
 10. Topunov M.V. A Nonlinear Time Optimal Control Problem. *Automation and Remote Control*, 2002, Vol. 63, No. 7, pp. 1062–1069.
 11. Srochko V.A. Modernizatsiya metodov gradientnogo tipa v zadachakh optimal'nogo upravleniya [Modernization of gradient-type methods in optimal control problems]. *Izv. vuzov. Matematika* [Izv. Universities. Mathematics], 2002, No. 12, pp. 66–78 (in Russian).
 12. Katoch S., Chauhan S.S., Kumar V. A Review on Genetic Algorithm: Past, Present, and Future. *Multimedia Tools and Applications*, 2021, Vol. 80, pp. 8091–8126; DOI: 10.1007/s11042-020-10139-6
 13. Trokoz D.A. Metod parametricheskoi optimizatsii dlya shirokikh neironnykh setei s ispol'zovaniem geneticheskikh algoritmov [Parametric optimization method for wide neural networks using genetic algorithms]. *Izv. Samar. nauchn. tsentra RAN* [Izv. Samara Sci. Center RAS], 2021, Vol. 23, No. 2, pp. 51–56 (in Russian); DOI: 10.37313/1990-5378-2021-23-2-51-56
 14. Kozuch D.J., Stillinger F.H., Debenedetti P.G. Genetic Algorithm Approach for the Optimization of Protein Antifreeze Activity Using Molecular Simulations. *J. Chemical Theory Comput*, 2020, Vol. 16, No. 12, pp. 7866–7873; DOI: 10.1021/acs.jctc.0c00773
 15. Jalali Z., Noorzai E., Heidari S. Design and optimization of form and facade of an office building using the genetic algorithm. *Sci. Technol. Built Environment*, 2020, Vol. 26, No. 2, pp. 128–140; DOI: 10.1080/23744731.2019.1624095
 16. Migov D.A., Volzhankina K.A., Rodionov A.S. Genetic Algorithms for Drain Placement in Wireless Sensor Networks Optimal by the Reliability Criterion. *Optoelectronics, Instrumentation and Data Processing*, 2021, Vol. 57, No. 3, pp. 240–249; DOI: 10.3103/S8756699021030110
 17. Panteleev A.V., Metlitskaya D.V. Primenenie geneticheskikh algoritmov s binarnym i veshchestvennym kodirovaniem dlya priblizhennogo sinteza suboptimal'nogo upravleniya determinirovannymi sistemami [An application of genetic algorithms with binary and real coding for approximate synthesis of suboptimal control in deterministic systems]. *Avtomatika i telemekhanika* [Automation and Telemechanics], 2011, No. 11, pp. 117–129 (in Russian).
 18. Diveev A.I. Reshenie zadachi optimal'nogo upravleniya ehvolyutsionnym algoritmom na osnove printsipa maksimuma Pontryagina [A solution of the optimal control problem by an evolutionary algorithm on the basis of the Pontryagin maximum principle]. *Voprosy teorii bezopasnosti i ustoychivosti sistem* [Issues of Security Theory and Stability of Systems], 2018, No. 20, pp. 3–17 (in Russian).
 19. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Algoritm poiska priblizhennogo resheniya zadachi optimal'nogo upravleniya khimicheskimi protsessami pri nalichii terminal'nykh ogranichenii [Algorithm for finding an approximate solution of the problem of optimal control of a chemical process in the presence of terminal restrictions]. *Vestn. Tomsk. gos. un-ta. Upravlenie, vychislitel'naya tekhnika i informatika* [Vestn. Tomsk State University. Management, Comput. Engrg. Comput. Sci.], 2022, No. 59, pp. 4–12 (in Russian); DOI: 10.17223/19988605/59/1

20. Gornov A.Yu. Vychislitel'nye tekhnologii resheniya zadach optimal'nogo upravleniya [Computational technologies for solving optimal control problems]. Novosibirsk: Nauka, 2009 (in Russian).
21. Antipina E.V., Mustafina S.A., Antipin A.F. Programmnoe obespechenie dlya avtomatizatsii protsessa poiska kineticheskikh parametrov khimicheskikh reaktsii [Software for automation of the search process for kinetic parameters of chemical reactions]. *Programmnye produkty i sistemy* [Software Products and Systems], 2020, No. 1, pp. 125–131 (in Russian).
22. Buldaev A.S. Metody nepodvizhnykh toчек v zadachakh optimizatsii upravlyaemykh sistem [Fixed-point methods in optimization problems for control systems]. *Itogi nauki i tekhniki. Sovremennaya matematika i ee prilozheniya. Tematicheskie obzory* [Results Sci. Technology. Ser. Modern Math. Appl. Thematic Rev.], 2020, Vol. 183, pp. 22–34 (in Russian); DOI: 10.36535/0233-6723-2020-183-22-34

УДК 534-18

ВЛИЯНИЕ ЭКРАНИРОВАНИЯ НАСЫПНОЙ СРЕДЫ НА ДИНАМИКУ УДАРНО-ВОЛНОВОГО ИМПУЛЬСА

© 2025 И. К. Гималтдинов^a, А. С. Родионов^b, Р. Ф. Гизатуллин^c,
Е. Ю. Кочанова^d

*Уфимский государственный нефтяной технический университет,
ул. Космонавтов, 1, г. Уфа 450064, Россия*

E-mails: ^ailjas_g@mail.ru, ^bartrodionov@mail.ru, ^cgiz-renat@yandex.ru,
^dmoto8728@mail.ru

Поступила в редакцию 28.06.2025 г.; после доработки 16.07.2025 г.;
принята к публикации 17.09.2025 г.

Изучено влияние экранирования на динамику прохождения ударно-волнового импульса в песчаной насыпной среде. Показано, что экранирование насыпной среды приводит к более сильному уменьшению амплитуды импульса по сравнению с «открытой» насыпкой. Приведено сравнение с экспериментальными данными.

Ключевые слова: ударная труба, экранирование, распад разрыва, зернистая среда, метод контрольного объёма, численные расчёты, моделирование.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2025.28.303

ВВЕДЕНИЕ

Интерес исследователей к изучению распространения волн в пористых средах связан с решением проблем взрывобезопасности [1, 2], защиты сооружений от воздействия ударных волн [3, 4], вопросами сейсморазведки и т. д. [5, 6]. Экспериментальные исследования по изучению взаимодействия ударно-волновых импульсов с пористой средой проводятся в ударных трубах [7, 8]. Традиционно ударные трубы используются для исследования особенностей распространения ударной волны в различных средах, анализа волновых свойств этих сред по скорости ударных волн и изменению формы падающего (основного) импульса. В ударной трубе, оснащённой секцией насыпных сред, волна многократно переотражается от поверхности изучаемой пористой среды и верхнего торца трубы. Использование переотраженных импульсов для изучения изменений в среде, произошедших под воздействием ударной волны, как зондирующих импульсов, было предложено в работе [9]. При изучении распространения ударного импульса в насыпных средах было выявлено образование пиков при прохождении зондирующего (переотраженного) импульса, амплитуда которого превышает амплитуду падающего импульса в 3–4 раза. В работе [10], являющейся продолжением работы [9], на основе результатов, полученных при различных слоях насыпной среды, установлено, что в верхнем слое песка формируется пик, вдвое превышающий амплитуду импульса на поверхности; по мере прохождения в толщу песка амплитуда пика парадоксально нарастает; форма импульса существенно изменяется с увеличением толщины слоя, пик смещается с заднего фронта к переднему, значительно нарастая по амплитуде. Условия формирования пиков давления в зондирующем импульсе при последовательных нагружениях изначально неутрамбованного-рыхлого песка изучены в [11], показано, что в рыхлом песке пики не образуются, при последовательных нагружениях песок уплотняется, и это приводит к формированию пиков на зондирующем импульсе. Эффект усиления ударно-волнового воздействия на насыпку из песка исследован

в работе [12], где показано, что воздействие ударной волны амплитудой 1.0 Мпа создаёт волну напряжения в среде, приводящую к уплотнению скелета, что приводит к усилению амплитуды волны в 4-5 раз в верхнем слое песка.

Отметим некоторые исследования, проведённые в ударных трубах и посвящённые исследованию динамики взаимодействия ударно-волнового импульса (УВИ) со слоем экранированной насыпной среды. Взаимодействие ударной волны с гранулированным слоем сферических частиц в ударной трубе исследовано в [13]. Между пористым слоем и торцевой стенкой трубы располагалась «приторцевая» область газа. Рассмотрены две постановки задачи. В первом варианте структура и положение пористого слоя предполагались неизменными. Во втором — гранулированный слой разрушался под действием падающей ударной волны и превращался в подвижное облако частиц. Для обоих вариантов получены и проанализированы волновые структуры, которые возникают как перед пористым слоем гранулированных частиц, так и в приторцевой области между гранулированным слоем и торцевой стенкой ударной трубы. Установлено, что в обоих случаях, по сравнению с «пустой» трубой, наблюдается уменьшение импульса воздействия на торцевую поверхность ударной трубы, а в случае неразрушаемого гранулированного слоя — и снижение абсолютного уровня давления. В работе [14] зернистый слой, на который падал УВИ, был покрыт на границе тонкой (10 мкм) полиэтиленовой плёнкой для предотвращения фильтрации газа. Основываясь на небольшой разнице по форме сигналов с покрытым зернистым слоем и непокрытым, сделано утверждение, что плёнка слабо влияет на условия удара, отмечено, что амплитуды сигналов в покрытом зернистом слое меньше, чем в непокрытом. Экспериментальному изучению эффективности системы песчаных барьеров для смягчения ударных волн посвящена работа [15]. Система песчаных барьеров сконструирована из кубической проволочной сетчатой опалубки, облицованной геотекстилем, и образует толстый защитный барьер, заполненный гранулированным материалом. В качестве гранулированного материала заполнения используются сухие песчаные частицы размером от микрометра до нескольких миллиметров (мелкие и крупные). Стекланные шарики сферической формы также используются в качестве материала заполнения для изучения влияния формы частиц заполнения на поведение затухания. Рассматривается процесс затухания ударной волны песчаным барьером с геотекстильной облицовкой и без неё. Эксперименты проводятся с использованием обычной ударной трубы, где генерируются ударные волны с числом Маха в диапазоне 1,29–1,70. Экспериментальные результаты показывают, что наличие слоя геотекстиля вносит значительный вклад в затухание ударной волны.

В данной работе экспериментально и теоретически изучается влияние наличия мембраны, примыкающей к насыпной пористой среде на динамику прохождения ударно-волнового импульса, падающего из области газа. Проведено сравнение с экспериментальными данными.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Пусть в ударной трубе (см. рис. 1), оснащённой секцией насыпной среды (СНС), после разрыва диафрагмы между камерой высокого давления (КВД) и камерой низкого давления (КНД) формируется ударная волна [9, 10]. Требуется изучить динамику ударно-волнового импульса при прохождении СНС, если насыпная среда экранирована невесомой и абсолютно жёсткой мембраной, размещённой непосредственно на поверхности насыпной среды и препятствующей фильтрации газа.

Для описания движения в насыпной среде будем полагать, что она представляет с собой смесь контактирующих друг с другом твёрдых частиц и газа, заполняющего поровое пространство. Используя общепринятые допущения для описания таких смесей, примем следующую систему уравнений [4], состоящую из уравнений сохранения масс:

$$\frac{\partial \rho_g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g v_g}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \rho_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho_s v_s}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

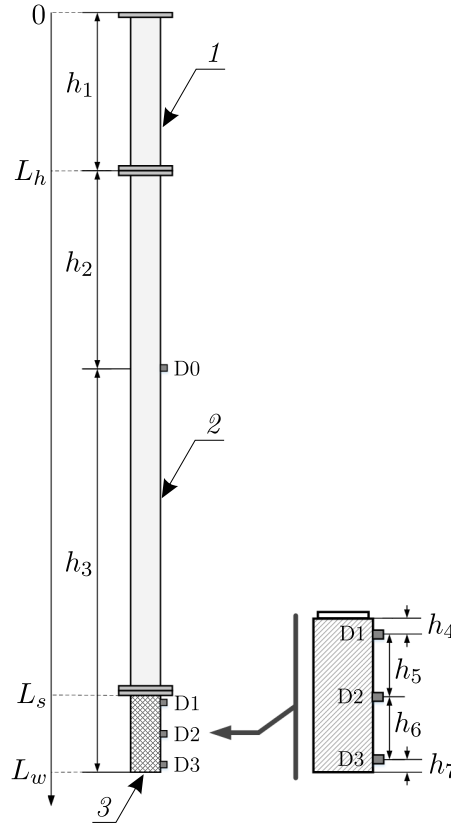


Рис. 1. Схематическое изображение ударной трубы:

1 — камера высокого давления (КВД), 2 — камера низкого давления (КНД),
 3 — секция насыпной среды (СНС); h_k — расстояния между датчиками ($k = \overline{1, 7}$):
 $h_1 = 531$ мм; $h_2 = 655$ мм; $h_3 = 1365$ мм; $h_4 = 22$ мм; $h_5 = 105$ мм; $h_6 = 105$ мм; $h_7 = 26$ мм

импульсов

$$\frac{\partial \rho_g v_g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g v_g^2}{\partial x} + \alpha_g \frac{\partial p_g}{\partial x} = -F_\mu - F_m, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho_s v_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho_s v_s^2}{\partial x} + \alpha_s \frac{\partial p_g}{\partial x} = \frac{\partial \sigma_{s*}}{\partial x} + F_\mu + F_m, \quad (3)$$

и энергии газовой и дисперсной фаз

$$\frac{\partial \rho_g u_g}{\partial t} + \frac{\partial \rho_g u_g v_g}{\partial x} + p_g \frac{\partial (\alpha_g v_g + \alpha_s v_s)}{\partial x} = (F_\mu + F_m)(v_g - v_s) - Q, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \rho_s u_s}{\partial t} + \frac{\partial \rho_s u_s v_s}{\partial x} - \sigma_{s*} e_{s*} = Q. \quad (5)$$

Скелет пористой среды будем считать вязкоупругим

$$\frac{\partial \sigma_{s*}}{\partial t} + \frac{\partial \sigma_{s*} v_s^2}{\partial x} = \sigma_{s*} e_s + E_{f*} e_{s*} - \frac{\sigma_{s*} - E_{e*} \xi_{s*}}{t_{s0}}, \quad (6)$$

$$\sigma_{s*} < 0, \quad e_{s*} \leq 0, \quad \sigma_{s*} = 0, \quad e_{s*} > 0.$$

Уравнение для продольной компоненты тензора приведённой скорости деформации твёрдой фазы примем в виде

$$e_{s*} = \frac{d_s \xi_{s*}}{dt} \equiv \frac{\partial v_s}{\partial x} \quad \frac{d_i}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + v_i \frac{\partial}{\partial x}, \quad (7)$$

$$E_{f*} = \rho_{s0} D_{f*}^2, \quad E_{e*} = \rho_{s0} D_{e*}^2.$$

Газ будем считать калорически совершенным, материал твёрдой фазы несжимаемым.

$$p_g = \rho_g^0 R T_g, \quad u_g = c_{vg} T_g, \quad (8)$$

$$\rho_s^0 = \text{const}, \quad u_s = c_s T_s, \quad (9)$$

$$\rho_i = \alpha_i \rho_s^0, \quad i = g, s, \quad \alpha_g + \alpha_s = 1.$$

здесь, ρ_i , v_i , u_i , T_i — приведённая плотность, массовая скорость, удельная внутренняя энергия и температура i -й фазы (нижние индексы $i = g, s$ соответствуют газу и твёрдой фазе), c_{vg} — удельная теплоёмкость газа при постоянном объёме, c_s — удельная теплоёмкость частиц; p_g — давление газовой фазы; R — газовая постоянная; σ_{s*} , ξ_{s*} — продольные компоненты тензоров приведённых напряжений и деформации твёрдой фазы пористой среды; E_{f*} , E_{e*} — динамический и статический модули упругости; D_{f*} , D_{e*} — продольные динамическая и статическая скорости звука в порошкообразной среде; F_μ , F_m — силы вязкого межфазного трения и «присоединённых масс», Q — интенсивность передачи тепла от газовой фазы к дисперсной в единице объёма смеси; t_{s0} — время релаксации напряжения в скелете порошкообразной среды при его вязкоупругом деформировании.

Составляющие силы межфазного взаимодействия задаются в виде [4, 16]

$$F_\mu = \frac{3}{4} \frac{\alpha_g \alpha_s}{d} C_d \rho_g^0 |v_g - v_s| (v_g - v_s), \quad F_m = \frac{\alpha_g \alpha_s}{2} C_m \rho_g^0 \left(\frac{dv_g}{dt} - \frac{dv_s}{dt} \right), \quad (10)$$

где d — диаметр частиц порошкообразной среды; C_d — коэффициент трения; C_m — коэффициент при силе «присоединённых масс», равный единице для зернистых сред с твёрдыми сферическими частицами [4]. Коэффициент трения сферических частиц в насыпных средах описывается на основе эмпирической формулы Эргана [4]

$$C_d = \frac{4}{3\alpha_g} \left(\frac{150(1 - \alpha_g)}{\alpha_g \text{Re}} + 1.75 \right), \quad \alpha_g \leq 0.55;$$

$$\text{Re} = \frac{(\rho_g^0 |v_g - v_s| d)}{\mu_g}, \quad \mu_g = \text{const}.$$

где Re — число Рейнольдса относительного движения фаз, μ_g — вязкость газовой фазы.

Интенсивность теплообмена фаз описывается зависимостью [4]

$$Q = \frac{6\alpha_s \lambda_g \text{Nu} (T_g - T_s)}{d^2}, \quad \lambda_g = \text{const},$$

где Nu — число Нуссельта, λ_g — теплопроводность газа. Число Нуссельта определяется следующей зависимостью [17]

$$\text{Nu} = \begin{cases} 2 + 0.106 \text{Re} \text{Pr}^{1/3}, & \text{Re} \leq 200, \\ 2.274 + 0.6 \text{Re}^{2/3} \text{Pr}^{1/3}, & \text{Re} > 200, \end{cases}$$

$$\text{Pr} = c_{pg} \mu_g / \lambda_g, \quad c_{pg} = \gamma c_{vg}, \quad \gamma = \text{const}.$$

Здесь γ и c_{pg} — показатель адиабаты и удельная теплоёмкость газа при постоянном давлении, Pr — число Прандтля газа.

2. НАЧАЛЬНЫЕ И ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ

В момент времени $t = 0$ в камере высокого давления (КВД) ударной трубы (рис. 1) в области $(0 \leq x \leq L_h)$ содержится воздух при повышенном давлении. Ниже, в области $L_h < x < L_s$, находится камера низкого давления (КНД), заполненная воздухом при атмосферном

давлении. В секции насыпной среды (НС) при $L_s \leq x < L_w$ находится слой песка, в порах которой также присутствует воздух. Тогда примем следующие начальные условия:

$$\begin{aligned} p &= p_{g1}, \quad \rho_g^0 = \rho_{g1}^0, \quad T_g = T_0, \quad v_g = 0, \quad \alpha_g = 1, \quad \alpha_s = 0, \quad (0 < x < L_h), \\ p &= p_0, \quad \rho_g^0 = \rho_{g0}^0, \quad T_g = T_0, \quad v_g = 0, \quad \alpha_g = 1, \quad \alpha_s = 0, \quad (L_h < x < L_s), \\ p_g &= p_0, \quad \rho_g^0 = \rho_{g0}^0, \quad T_g = T_0, \quad \alpha_g = \alpha_{g0}, \\ v_s &= 0, \quad \sigma_{s*} = 0, \quad \xi_{s*} = 0, \quad e_{s*} = 0, \quad \alpha_s = \alpha_{s0} = 1 - \alpha_{g0}, \quad (L_h < x < L_w) \end{aligned} \quad (11)$$

Нижний индекс «0» соответствует невозмущённым параметрам системы. Будем полагать, что поверхность песчаной насыпки экранирована невесомой мембраной незначительной толщины, которая препятствует фильтрации газа, тогда граничные условия при $(x = L_s)$ запишутся в виде [18]:

$$\begin{aligned} p_g|_{x=L_s+0} - p_0 &= \alpha_g(p_g|_{x=L_s-0} - p_0), \\ \sigma_{s*}|_{x=L_s+0} &= \alpha_g p_g|_{x=L_s-0}, \\ (v_s - v_g)|_{x=L_s+0} &= 0. \end{aligned} \quad (12)$$

На торцах трубы заданы следующие граничные условия:

$$\begin{aligned} v_g &= 0, \quad (x = 0), \\ v_s &= 0, \quad (x = L_w). \end{aligned} \quad (13)$$

3. МЕТОД РЕШЕНИЯ

Для численного решения системы уравнений (1)–(13) введена равномерная пространственная сетка размерности N с границами в точках, $i = \overline{0, N}$. Скорости газа и скелета заданы на границах ячеек в точках x^i , а все остальные параметры — в центре ячеек в точках $x_i = x^i - h/2$, где h — шаг по координате. Использована неявная схема, основанная на методе контрольного объёма [19, 20]. Уравнения (1)–(7) аппроксимируются с первым порядком точности по времени и вторым по пространству, которые решаются итерационной процедурой в каждом шаге по времени. Шаг по времени подчиняется следующему условию:

$$\tau \leq \frac{h}{\max(D_f, C_g)},$$

где C_g — скорость звука в воздухе.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТОВ И РАСЧЁТОВ

В результате распада разрыва в КНД формируется ударно-волновой импульс амплитудой около 13 кПа и протяжённостью 1.3 м (см. рис. 2(а), $t = 1.0$ мс), протяжённость импульса по времени составляет приблизительно 4 мс. В область КВД распространяется волна разрежения. Скорость газа за УВИ составляет около 31 м/с (см. рис. 2(б)).

Параметры расчёта: $p_0 = 0.101$ МПа, $T_0 = 300$ К, $\gamma = 1.4$, $R = 287$ Дж/(кг·К), $c_{vg} = 720$ м²/(с²·К), $\mu_g = 1.81 \cdot 10^{-5}$ кг/(м·с), $\lambda_g = 0.0258$ кг·м/(с²·К), $\alpha_g = 0.39$, $\rho_s^0 = 2700$ кг/м³, $c_s = 560$ м²/(с²·К), $D_{f*} = 200$ м/с, $D_{e*} = 0$ м/с, $t_{s0} = 4 \cdot 10^{-5}$, $d = 1$ мм, $\Delta p_0 = 28$ кПа/

После достижения УВИ границы «газ–экранированная насыпная среда» ($x = L_s$) формируется нестационарная отражённая ударная волна в «чистом» газе. В насыпной среде образуется волна напряжения. Возникновение ударной волны в «чистом» газе обусловлена волнами сжатия, образующимися в результате торможения набегающего потока на границе экранированной насыпной среды. Распространяясь в сторону, противоположную движению падающей

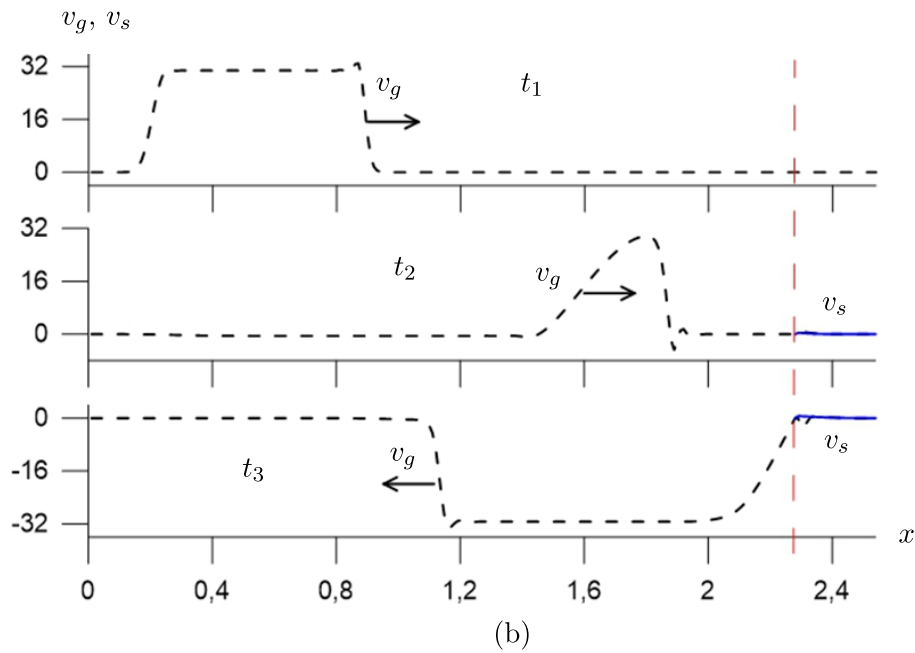
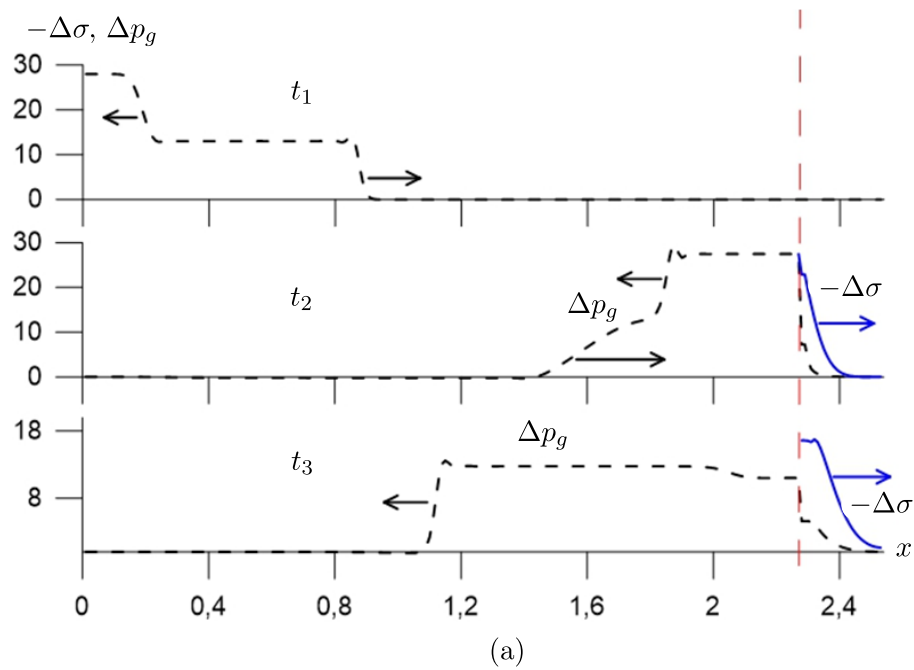


Рис. 2. Расчётные профили полного напряжения ($-\Delta\sigma = -\sigma_* + \Delta p_g$, сплошные линии) и давления в газе ($\Delta p_g = p_g - p_0$, пунктирные линии) при взаимодействии УВИ с экранированной насыпкой для моментов времени $t_1 = 1.0$ мс, $t_2 = 6.0$ мс, $t_3 = 8.0$ мс (а); профили скоростей газа v_g и скелета v_s в те же моменты времени (б)

волны, система догоняющих друг друга волн сжатия постепенно порождает отражённую ударную волну в газе. Давление газа за отражённой ударной волной стремится к давлению отражения от жёсткой неподвижной стенки и достигает значения 27 кПа ($t = 6.0$ мс). Отражённая волна в момент времени 8.0 мс имеет амплитуду 13 кПа, скорость газа за отражённым УВИ составляет около 31 м/с. Экранирование пористой среды на границе исключает фильтрацию газа, но тем не менее, воздействие УВИ на экранированную насыпку приводит к инициированию в ней «быстрой» и «медленной» волн (рис. 2, $t = 6.0$ и 8.0 мс). Амплитуда «быстрой»

волны в момент $t = 8.0$ мс достигает значения 17 кПа, а «медленной» — 5 кПа, при этом скорости скелета и газа ничтожно маленькие.

Для сравнения динамики взаимодействия УВИ с экранированной насыпной средой и без экранирования на рис. 3 приведены распределения полного напряжения и давления в газе (а), скорости газа и скелета (b) для «открытой» насыпки для моментов 6.0 и 8.0 мс, для момента 1.0 мс профили такие же, как на рис. 1.

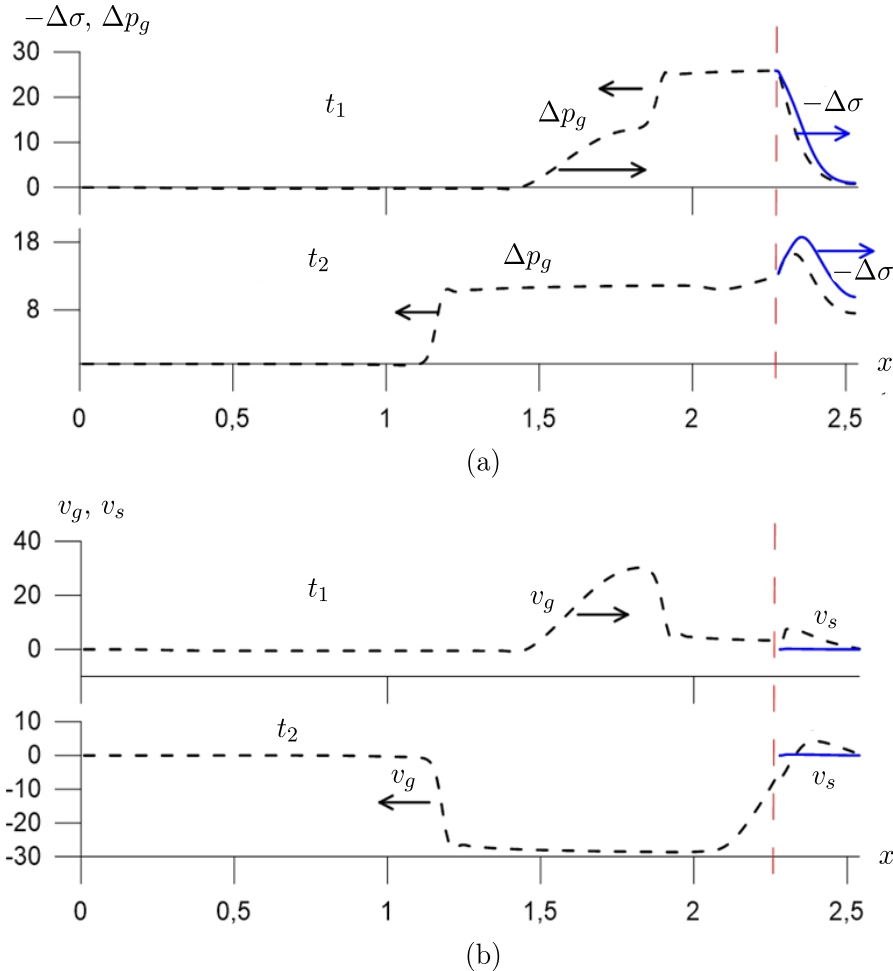


Рис. 3. То же, что и на рис. 1, но насыпная среда «открыта» (не экранирована), параметры расчёта такие же как для рис. 2

Для «открытой» насыпной среды, в отличие от экранированной, амплитуды и скорости «быстрой» и «медленной» волны для момента $t = 6.0$ мс практически одинаковы (см. рис.3(a)), скорость газа в СНС достигает значения 8.3 м/с, скорость скелета — 0.2 м/с.

Сопоставление экспериментальных (а) и расчётных (b) «осциллограмм» для экранированной насыпки приведены рис. 4.

В экспериментах секция насыпной среды послойно заполнялась песком, с сильной утряской и умеренной трамбовкой, пористость уплотнённого таким образом песка составила 39,2%.

Средний размер песчинок 0.5 мм. Нагнетание воздуха в КВД при некотором давлении приводит к разрыву диафрагмы из кальки. Отметим, что давление разрыва в экспериментах является нерегулируемым параметром, поэтому амплитуда начального давления в КВД в экспериментах и расчётах для случая экранированной насыпки — 28 кПа, для «открытой» — 32 кПа.

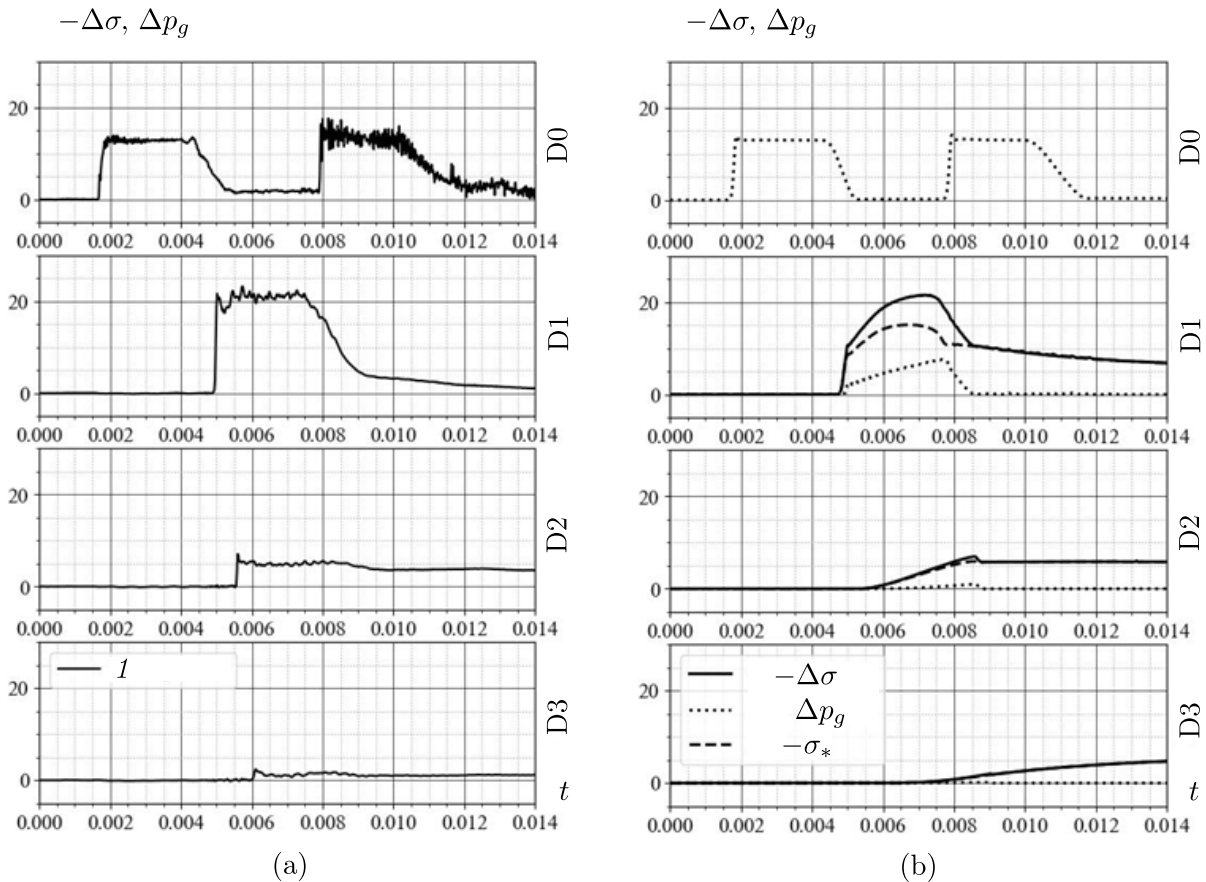


Рис. 4. Экспериментальные (а, 1) и расчётные (б) «осциллограммы» полного напряжения, давления в газе и приведённого напряжения (сплошные, пунктирные и штриховые линии соответственно) по данным датчиков D0–D1 (см. рис. 1) для случая экранирования насыпной среды. Параметры расчёта такие же, как для рис. 2

Для экранирования песчаной насыпки использовали алюминиевую фольгу, предотвращающую фильтрацию воздуха в песчаную насыпную среду. После разрыва диафрагмы в КНД формируется ударно-волновой импульс. Профиль давления сформировавшегося импульса амплитудой 12 кПа регистрируется датчиком D0 (см. рис. 4(а)). Амплитуда ударной волны однозначно связана с давлением разрыва диафрагмы. Сформировавшийся импульс распространяется по трубе, при взаимодействии с поверхностью песка амплитуда импульса удваивается и в насыпную среду проникает импульс удвоенной амплитудой, рис. 3(а) (датчик D1), причём над датчиком D1 расположен слой песка толщиной 22 мм, амплитуда УВИ уменьшается на 15%.

Известно [4,m18], что полное напряжение в пористой среде, регистрируемое пьезоэлектрическими датчиками, складывается из приведённого напряжения в скелете и давления в насыщающем поровое пространство флюиде. На рис. 4(б) показаны расчётные осциллограммы давления Δp_g , приведённого напряжения в скелете $-\sigma_*$ и полного напряжения $-\Delta\sigma = -\sigma_* + \Delta p_g$.

Из сравнительного анализа экспериментальных и расчётных осциллограмм, следует, что есть хорошее согласие по амплитудам волн, соответствующих датчикам D0–D2 (см. рис. 4). Необходимо отметить, что основной вклад в полное напряжение на всех осциллограммах (D1–D3) вносит приведённое напряжение, вклад давления газа мал. Фронт УВИ для расчётных осциллограмм на всех датчиках более пологий по сравнению с экспериментальными. Расхождение формы импульсов, а именно переднего фронта, в песке может быть связано с неоднородной утрамбовкой песка или неоднородностью по размерам.

Для датчика D3, амплитуда осциллограммы, полученной в эксперименте приблизительно 2 кПа и импульс постепенно затухает, а амплитуда расчётных осциллограмм постепенно повышается до 5 кПа.

Расчётные осциллограммы скорости газа v_g для датчиков D0–D3 и скорости скелета v_s для датчиков D1–D3 для случая экранированной песчаной насыпки приведены на рис. 5.

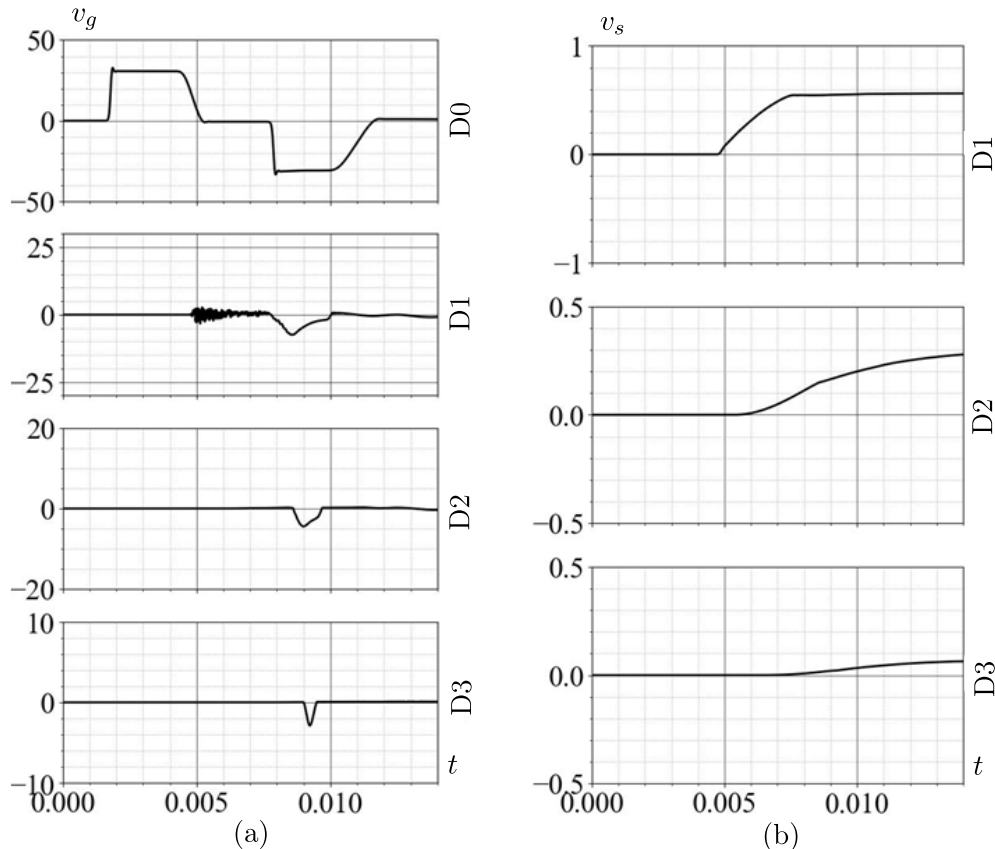


Рис. 5. Осциллограммы скоростей газа (a) и скелета (b)

Скорость газа v_g за падающим и отражённым УВИ, «регистрируемое» датчиком D0 около 31 м/с (рис. 5, D0). Интересным является то, что значения скоростей газа на датчиках D1–D3 (рис. 5) являются отрицательными. Это происходит из-за того, что под действием ударного импульса происходит сжатие насыпной среды, далее происходит его растяжение, так как нет фильтрации на границе растяжение приводит к появления движения газа с отрицательной скоростью.

Скорость скелета v_s на всех трёх датчиках D1–D3 плавно увеличивается: на датчике D1 достигает значения 0.6 м/с, на D2 — 0.3 м/с, D3 — 0.07 м/с.

На рис. 6 представлено сопоставление экспериментальных (a) и расчётных (b) осциллограмм для «открытой» песчаной насыпной среды.

Из сравнительного анализа рис. 4 и 6 следует, что для экранированной насыпки амплитуда импульса, проходящего 22 мм снижается на 15% по сравнению с насыпкой с открытой поверхностью, кроме этого, есть существенная разница в показании датчика D2, например, амплитуда импульса на этом датчике для экранированной насыпки приблизительно равна 5 кПа, а для «открытой» в три раза больше — 15 кПа (см. рис. 4(a) и 6(a) датчик D2). На уровне датчика D3 в экспериментах независимо «открытая» насыпка или экранированная импульс практически полностью затухает — амплитуда импульса около 2 кПа. Амплитуда импульса расчётной осциллограммы полного напряжения на датчике D3, в случае «открытой» насып-

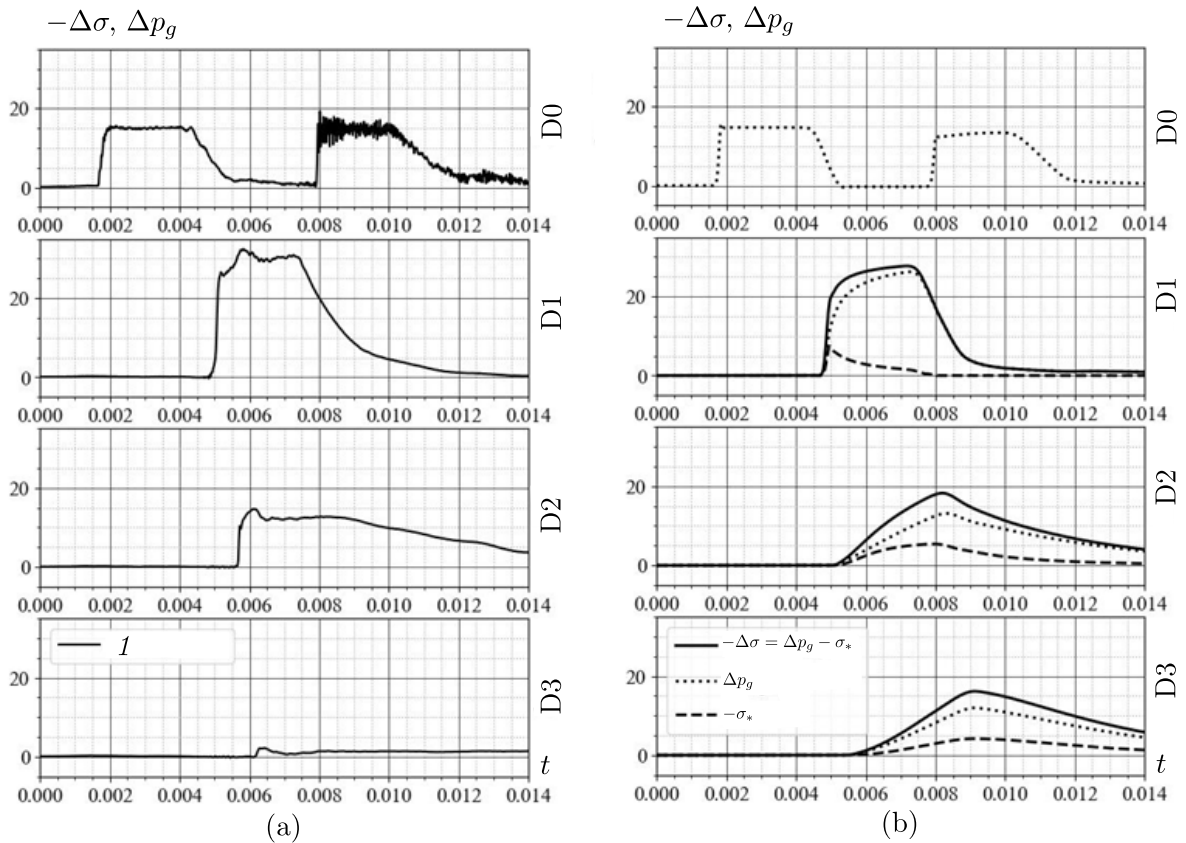


Рис. 6. То же, что и на рис. 4, но для «открытой» насыпки, $\Delta p_0 = 32$ кПа, остальные параметры расчёта такие же как для рис. 2

ки, почти в три раза превышает амплитуду импульса, полученного в эксперименте (рис. 6(b), датчик D3), что, вероятно, связано с неоднородностью утрамбовки песка при экспериментах.

Из расчётных осциллограмм (рис. 6(b)) следует, что в случае «открытой» песчаной насыпки давление в газе играет основную роль в формировании полного напряжения по сравнению с приведённым напряжением, а в случае экранированной насыпки, наоборот, приведённое напряжение вносит основной вклад в полное напряжение (рис. 4(b)).

Скорость газа за УВИ в случае «открытой» насыпки для датчика D0 по форме идентична скорости в случае экранированной насыпки. Из-за фильтрации газа на границе $x = L_s$, для случая «открытой» насыпки скорость газа за падающим импульсом для датчиков D1-D3 больше нуля (рис. 7(a)) в отличие от скорости газа в случае экранированной насыпки (рис. 4(a)).

Максимальные значения скоростей газа на датчиках D1, D2, D3 равны 15.0, 5.0, 3.0 м/с соответственно. Профили скорости скелета v_s для «открытой» насыпки имеют вид импульса в отличие от профилей скорости для экранированной среды (рис. 5, рис. 7(b)). Максимальное значение скоростей скелета 0.4, 0.21, 0.05 м/с соответственно на уровне датчиков D1, D2 и D3.

Для того, чтобы иметь представление об упругости насыпной среды, проведены измерения скоростей распространения ударно-волновых импульсов по эпюрам давления. Были измерены значения скоростей УВИ во всем слое песка — V (между датчиками D1 и D3), в верхнем слое — V_1 (D1 и D2) и нижнем — V_2 (D2 и D3) для случаев «открытой» и экранированной мембраной из фольги, рис. 8.

Относительная погрешность измерения скорости в экспериментах была незначительна, поскольку измерения расстояния и времени производятся с большой точностью. Но прямые измерения времени прохождения импульсов связаны с определением точки начала нарастания распространяющегося импульса, большие погрешности возникают при плавном нарастании

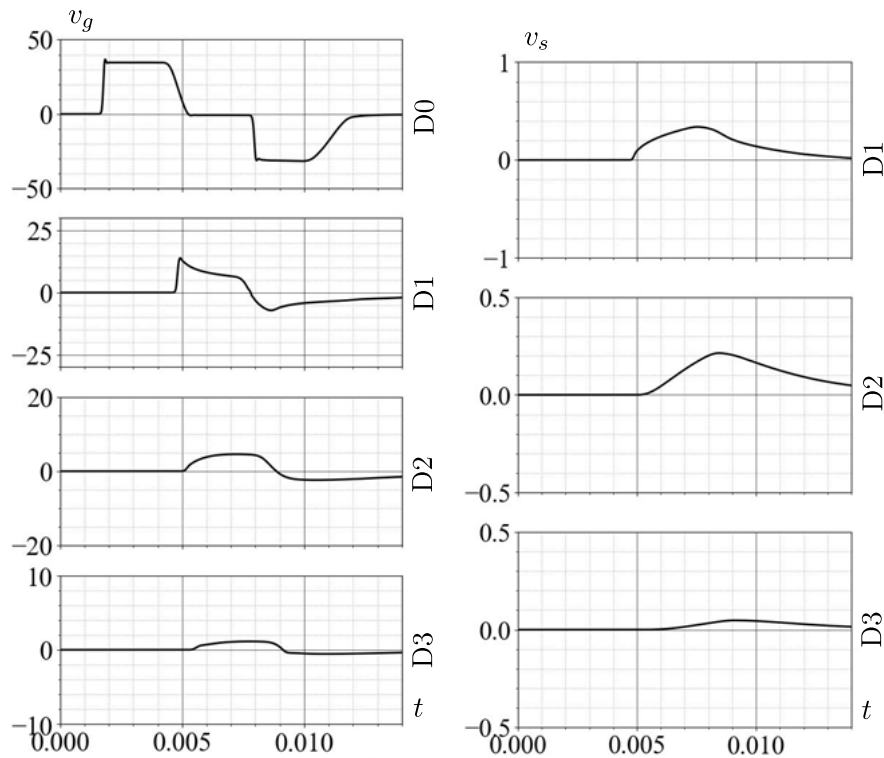


Рис. 7. То же, что и на рис. 5, но для «открытой» насыпки.
 Параметры расчёта как для рис. 6

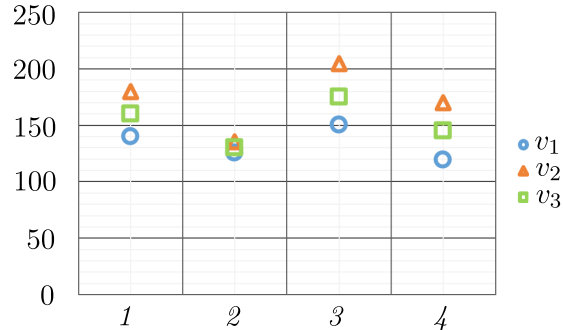


Рис. 8. Значения экспериментальных и расчётных значений скоростей ударно-волновых импульсов в насыпной среде из песка; V_1 — средняя скорость между датчиками D1–D3, V_2 и V_3 — соответственно между D1–D2 и D1–D3;
 1 — открытая, эксперимент; 2 — открытая, расчёт;
 3 — фольга, эксперимент; 4 — фольга, расчёт

давления. Поэтому при усреднении трёх измерений возникают заметные отклонения, тем не менее, среднеквадратичное отклонение не превышает 10 м/с. В нижней части насыпной среды скорости больше, по сравнению с их значениями в верхней части. Это свидетельствует о том, что в нижней части СНС плотность песка выше, так как при утряске нижний слой уплотняется больше, поскольку сверху просыпаются мелкие песчинки, что приводит к увеличению упругости нижнего слоя.

Экранирование фольгой значительно увеличивает скорость, хотя волна распространяется только по скелету пористой среды. В верхнем слое скорость увеличивается сильнее, чем в нижнем, и это приводит к уменьшению разницы между скоростями в верхней и нижней слоях при наличии фольги. Значение скорости импульса при экранировании фольгой больше,

чем для «открытой» насыпки, что, скорее всего, связано с компактированием скелета песчаной насыпки в отсутствии амортизирующей роли воздуха.

Авторы благодарят А. Т. Ахметова, зав. лаб. «Экспериментальная гидродинамика» института механики им. Р. Р. Мавлютова УФИЦ РАН, за полезные обсуждения результатов экспериментов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сравнительный анализ эпюр давления УВИ, проходящих в «открытую» и экранированную песчаную насыпку, позволяет сделать следующие выводы:

В песчаной насыпной среде наличие экранирующей фольги практически не сказывается на форме распространяющегося в ней УВИ, но его амплитуда меньше по сравнению с амплитудой УВИ для насыпки с «открытой» поверхностью, что обусловлено исключением потока газа в песчаную насыпку.

Значение скорости импульса при экранировании фольгой больше, чем для «открытой» насыпки, что связано с компактированием скелета песчаной насыпки в отсутствии амортизирующей роли воздуха.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 24-11-00274, <https://rscf.ru/project/24-11-00274/>). 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. Балапанов Д.М., Урманчеев С.Ф. Роль межфазных взаимодействий при газовой детонации в инертной пористой среде // Письма в ЖТФ. 2010. Т. 36, № 13. С. 71–80.
2. Уткин П.С., Чупров П.А. Численное моделирование распространения зондирующих импульсов в плотной засыпке гранулированной среды // Компьютерные исследования и моделирование, 2024. Т. 16, № 6, С. 1361–1384
3. Мирова О.А., Баженова Т.В., Голуб В.В. Влияние экрана из гранулированного материала на многократное отражение плоской ударной волны внутри замкнутого объема // Теплофизика высоких температур. 2020. Т. 58, № 1. С. 144–147; DOI: 10.31857/S0040364420010135
4. Болдырева О.Ю., Губайдуллин А.А., Дудко Д.Н., Кутушев А.Г. Численное исследование передачи ударно-волновой нагрузки экранируемой плоской стенке через слой порошкообразной среды и разделяющий их воздушный зазор // Физика горения и взрыва. 2007. Т. 43, № 1. С. 132–142. - EDN OIHGZJ.
5. Дучков А.Д., Дучков А.А., Дугаров Г.А., Дробчик А.Н. Скорости ультразвуковых волн в песчаных образцах, содержащих воду, лёд или гидраты метана и тетрагидрофурана (лабораторные измерения) // Доклады АН. 2018. Т. 478, № 1. С. 94–99.
6. Мейрманов А.М. Метод двухмасштабной сходимости Нгуетсенга в задачах фильтрации и сейсмоакустики в упругих пористых средах // Сиб. мат. журн. 2007. Т. 48, № 3. С. 645–667.
7. Гельфанд Б.Е., Медведев С.П., Поленов А.Н., Фролов С.М. Передача ударно-волновой нагрузки насыщенным средам // Прикл. механика и техн. физика. 1988. № 2. С. 115–121.
8. Донцов В.Е., Накоряков В.Е., Покусаев Б.Г. Распространение волн давления в газонасыщенной пористой среде // Акустический журн. 1994. Т. 40, № 4. С. 683–685.

9. Ахметов А.Т., Гималтдинов И.К., Азаматов М.А., Мухаметзянов А.Ф., Богданов Д. Р. Зондирование водогазонасыщенных насыпных сред переотраженными волнами непосредственно после воздействия ударной волны // Письма в Журн. техн. физики. 2022. Т. 48, № 1. С. 23–26.
10. Ахметов А.Т., Гималтдинов И.К., Мухаметзянов А.Ф., Гизатуллин Р.Ф. Эффект усиления ударных волн в насыпных средах // Доклады Российской академии наук. Физика, технические науки. 2024. Т. 519, № 1. С. 41–46; DOI: 10.31857/S2686740024060076
11. Ахметов А. Т., Гималтдинов И. К., Мухаметзянов А. Ф. Выявление условий формирования пиков давления в зондирующем импульсе // Инженерно-физ. журн. 2025. Т. 98, № 1. С. 190–196.
12. Padmanabha Vivek, Thallak G. Sitharam Laboratory scale investigation of stress wave propagation and vibrational characteristics in sand when subjected to air-blast loading // Inter. J. Impact Engrg. 2018. V 114. P. 169–181.
13. Булович С.В., Масюкевич А.В. Экспериментальное исследование взаимодействия ударной волны со слоем проницаемого материала // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2019. Т. 12. № 4. С. 135–144.
14. Britan A. Ben-Dor G. Elperin T. Igra O. Jiang J. Mechanism of compressive stress formation during weak shock waves impact with granular materials // Experiments in Fluids. 1997. N 22. P. 507–518; 10.1007/s003480050078.
15. Vivek P., Sitharam T.G. Shock Wave Attenuation by Geotextile Encapsulated Sand Barrier Systems // Geotextiles and Geomembranes. 2017. V. 45. P. 149.
16. Нигматуллин Р.И. Динамика многофазных сред. М.:Наука, 1987.
17. Чудновский А.Ф. Теплообмен в дисперсных средах. М.: Гостехиздат, 1954.
18. Губайдуллин А.А., Болдырева О.Ю., Дудко Д.Н. Взаимодействие акустических волн с пористым слоем // Теплофизика и аэромеханика. 2009. Т. 16, № 3. С. 455–470.
19. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости. М.: Энергоатомиздат, 1984.
20. Ильясов А.М., Моисеев К.В., Урманчеев С.Ф. Численное моделирование термоконвекции жидкости с квадратичной зависимостью вязкости от температуры // Сиб. журн. индустр. математики. 2005. Т. 8, № 4. С. 51–59.

UDC 534-18

THE INFLUENCE OF BULK MEDIUM SHIELDING ON THE DYNAMICS OF A SHOCK WAVE IMPULSE

© 2025 I. K. Gimaltdinov^a, A. S. Rodionov^b, R. F. Gizatullin^c,
E. Yu. Kochanova^d

*Ufa State Petroleum Technological University,
ul. Kosmonavtov, 1, Ufa 450064, Russia*

E-mails: ^ailjas_g@mail.ru, ^bartrodionov@mail.ru, ^cgiz-renat@yandex.ru,
^dmoto8728@mail.ru

Received 28.06.2025, revised 16.07.2025, accepted 17.09.2025

Abstract. The effect of shielding on the dynamics of the shock-wave pulse propagation in a sandy bulk medium is studied. It is shown that shielding of the bulk medium leads to a stronger decrease in the pulse amplitude compared to «open» fill. A comparison with experimental data is given.

Keywords: shock tube, shielding, fracture decay, granular medium, control volume method, numerical calculations, modeling.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2025.28.303

REFERENCES

1. Balapanov D.M., Urmancheev S.F. Rol' mezhfaznykh vzaimodeistvii pri gazovoi detonatsii v inertnoi poristoi srede [The role of interphase interactions in gas detonation in an inert porous medium]. *Pis'ma v Zhurn. Tech. Fiziki* [Lett. J. Tech. Phys.], 2010, Vol. 36, No. 13, pp. 71–80 (in Russian).
2. Utkin P.S., Chuprov P.A. Chislennoe modelirovanie rasprostraneniya zondiruyushchikh impul'sov v plotnoi zasypke granulirovannoi sredy [Numerical modeling of the propagation of sounding pulses in a dense packing of a granular medium]. *Komp'yuternye Issledovaniya i Modelirovanie* [Comput. Research and Modeling], 2024, Vol. 16, No. 6, pp. 1361–1384 (in Russian).
3. Mirova O.A., Bazhenova T.V., Golub V.V. Vliyanie ekrana iz granulirovannogo materiala na mnogokratnoe otrazhenie ploskoi udarnoi volny vnuti zamknutogo ob'ema [Influence of a screen made of granular material on the multiple reflection of a plane shock wave inside a closed volume]. *Teplofiz. Vysokikh Temperatur* [Thermophys. High Temperatures.], 2020, Vol. 58, No. 1, pp. 144–147 (in Russian). - DOI 10.31857/S0040364420010135. - EDN EJMKNKJ.
4. Boldyreva O.Yu., Gubaidullin A.A., Dudko D.N., Kutushev A.G. Chislennoe issledovanie peredachi udarno-volnovoi nagruzki ekraniruemoi ploskoi stenke cherez sloi poroshkoobraznoi sredy i razdelyayushchii ikh vozdukhnyi zazor [Numerical investigation of the shock-wave load transfer to a shielded flat wall through a layer of powdered medium and the air gap separating them]. *Fizika Goreniya i Vzryva* [Phys. Gorenje Explosion], 2007, Vol. 43, No. 1, pp. 132–142 (in Russian). - EDN OIHGZJ.
5. Duchkov A.D., Duchkov A.A., Dugarov G.A., Drobchik A.N. Skorosti ul'trazvukovykh voln v peschanykh obraztsakh, sodержashchikh vodu, led ili gidraty metana i tetragidrofurana (laboratornye izmereniya) [Velocities of ultrasonic waves in sand samples containing water, ice, or hydrates of methane and tetrahydrofuran (laboratory measurements)]. *DAN*, 2018, Vol. 478, No. 1, pp. 94–99 (in Russian).

6. Meirmanov A.M. Metod dvukhmasshtabnoi skhodimosti Nguetsenga v zadachakh fil'tratsii i seismoakustiki v uprugikh poristyykh sredakh [Nguetseng's two-scale convergence method in problems of filtration and seismoacoustics in elastic porous media]. *Sib. Mat. Zhurn.*, 2007, Vol. 48, No. 3, pp. 645–667 (in Russian).
7. Gelfand B.E., Medvedev S.P., Polenov A.N., Frolov S.M. Peredacha udarno-volnovoi nagruzki nasypnym sredam [Transfer of shock-wave load to bulk media]. *Prikl. Mekh. Tekhn. Fiz.* [Appl. Mechanics Tech. Phys.], 1988, No. 2, pp. 115–121 (in Russian).
8. Dontsov V.E., Nakoryakov V.E., Pokusaev B.G. Rasprostranenie voln davleniya v gazonasyschennoi poristoi srede [Propagation of pressure waves in a gas-saturated porous medium]. *Akusticheskii Zhurn.* [Acoustic J.], 1994, Vol. 40, No. 4, pp. 683–685 (in Russian).
9. Akhmetov A.T., Gimaltdinov I.K., Azamatov M.A., Mukhametzyanov A.F., Bogdanov D.R. Zondirovanie vodogazonasyschennykh nasypnykh sred pereotrazhennymi volnami neposredstvenno posle vozdeistviya udarnoi volny [Probing of water-gas-saturated bulk media by re-reflected waves immediately after the impact of a shock wave]. *Pis'ma v Zhurn. Tekhn. Fiziki* [Lett. J. Tech. Physics.], 2022, Vol. 48, No. 1, pp. 23–26 (in Russian).
10. Akhmetov A.T., Gimaltdinov I.K., Mukhametzyanov A.F., Gizatullin R.F. Effekt usileniya udarnykh voln v nasypnykh sredakh [Effect of shock wave amplification in bulk media]. *Dokl. RAN. Fizika, Tekhn. Nauki*, 2024, Vol. 519, No. 1, pp. 41–46 (in Russian); DOI: 10.31857/S2686740024060076.
11. Akhmetov A.T., Gimaltdinov I.K., Mukhametzyanov A.F. Vyyavlenie uslovii formirovaniya pikov davleniya v zondiruyushchem impul'se [Identifying the conditions for the formation of pressure peaks in a sounding pulse]. *Inzhenerno-Fiz. Zhurn.* [Engrg. Phys. J.], 2025, Vol. 98, No. 1, pp. 190–196 (in Russian).
12. Padmanabha Vivek, Thallak G. Sitharam Laboratory scale investigation of stress wave propagation and vibrational characteristics in sand when subjected to air-blast loading. *Internat. J. Impact Engrg.*, 2018, Vol. 114, pp. 169–181.
13. Bulovich S.V., Masyukevich A.V. Eksperimental'noe issledovanie vzaimodeistviya udarnoi volny so sloem pronitsaemogo materiala [Experimental study of the interaction of a shock wave with a layer of permeable material]. *Nauchno-Tekhn. Vedomosti SPbGPU. Fiz.-mat. nauki* [Scientific Techn. Bull. SPbGPU. Phys. Math. Sci.], 2019, Vol. 12, No. 4, pp. 135–144 (in Russian).
14. Britan A. Ben-Dor G. Elperin T. Igra O. Jiang J. Mechanism of compressive stress formation during weak shock waves impact with granular materials. *Experiments in Fluids*, 1997, Vol. 22, pp. 507–518; DOI: 10.1007/s003480050078.
15. Vivek P., Sitharam T.G. Shock Wave Attenuation by Geotextile Encapsulated Sand Barrier Systems. *Geotextiles and Geomembranes*, 2017, Vol. 45, p. 149.
16. Nigmatulin R.I. Dinamika mnogofaznykh sred. [Dynamics of multiphase media]. Moscow: Nauka, 1987 (in Russian).
17. Chudnovskii A.F. Teploobmen v dispersnykh sredakh [Heat transfer in disperse media]. Moscow: Gostekhizdat, 1954 (in Russian).
18. Gubaidullin A.A., Boldyreva O.Yu., Dudko D.N. Vzaimodeistvie akusticheskikh voln s poristym sloem [Interaction of acoustic waves with a porous layer]. *Teplofiz. Aeromekhanika*, 2009, Vol. 16, No. 3, pp. 455–470 (in Russian).
19. Patankar S. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Washington: Hemisphere Publ. Corp., 1980
20. Iljasov A.M., Moiseev K.V., Urmancheev S.F. Chislennoe modelirovanie termokonveksii zhidkosti s kvadrachnoi zavisimost'yu vyazkosti ot temperatury [Numerical modeling of thermoconvection of a fluid with a quadratic dependence of viscosity on temperature]. *Sib. Zhurn. Indust. Mat.*, 2005, Vol. 8, No. 4(24), pp. 51–59 (in Russian).

УДК 534-8

МОДЕЛЬ ФОРМИРОВАНИЯ КОРОТКИХ КАПИЛЛЯРНЫХ ВОЛН НА ГРАНИЦЕ «ЖИДКОСТЬ–ГАЗ» ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ИМПУЛЬСНЫХ УДАРНЫХ ВОЗМУЩЕНИЙ В ХОДЕ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ КАВИТАЦИИ

© 2025 Р. Н. Голых^{1а}, Ж.-Б. Карра^{2б}

¹Бийский технологический институт (филиал) ФГБОУ ВО «Алтайский государственный технический университет им. И. И. Ползунова», ул. им. Героя Советского Союза Трофимова, 27, г. Бийск 659305, Россия,

²Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, просп. Акад. Лаврентьева, 15, г. Новосибирск 630090, Россия,

E-mails: ^аromangl90@gmail.com, ^бjb.carrat@gmail.com

Поступила в редакцию 23.10.2024 г.; после доработки 05.06.2025 г.; принята к публикации 17.09.2025 г.

Предложена модель формирования линейных коротких капиллярных волн на поверхности «газ-жидкость» в неограниченном объёме жидкости под воздействием ударных волн, которые генерируются при схлопывании микроскопических (размером 0,0001...0,2 мм) кавитационных пузырьков, формируемых ультразвуковыми колебаниями. Рассматриваемая межфазная поверхность представляет собой границу крупного барботажного пузырька (размером 1...5 мм), образуемого при принудительной инжекции газа в жидкость, размер которого значительно превышает размер кавитационного пузырька и длину капиллярной волны. Для выявления профиля межфазной поверхности построены уравнения распространения капиллярных волн в формулировке классических и обобщённых функций, которые учитывают: вязкость жидкой фазы; затухание колебаний волн со временем за счёт вязкости жидкой фазы, из которого следует ограниченность амплитуды волн (несмотря на то, что при отсутствии затухания волна может совершать колебания во времени неограниченно долго). Доказано существование и единственность решения уравнений в классической формулировке при гармонической внешней силе, инициирующей формирование волн. Установлено, что для уравнений в обобщённых функциях для случая схлопывания множества пузырьков в ограниченном объёме жидкости профиль смещения межфазной поверхности является регулярной обобщённой функцией. Построены оценочные зависимости усреднённого увеличения межфазной поверхности от параметров ультразвукового воздействия и вязкости жидкости. Зависимости показали увеличение межфазной поверхности до 1,5 раз и более для жидкости, по вязкости не превышающей вязкость воды. Полученное значение близко к экспериментальным данным. Установлено существование предельной вязкости, начиная с которой эффект перестаёт быть заметным. Это свидетельствует о необходимости проведения исследований при различных температурах среды. Поскольку с одной стороны, при повышении температуры снижается вязкость жидкой фазы, а с другой стороны уменьшается степень развитости кавитации. По всей видимости, в связи с этим может существовать оптимальная температура для увеличения межфазной поверхности за счёт формирования капиллярных волн.

Ключевые слова: кавитация, ультразвук, колебания, капиллярная волна, модель, дробный лапласиан.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2025.28.304

ВВЕДЕНИЕ

Массообменные процессы газа, растворённого в жидкости, являются медленными диффузионными процессами по сравнению с массообменом газа, растворённого в газе, или жидкости,

растворённой в другой жидкости. Это связано с малым коэффициентом диффузии газа в жидкости, который в 5000...10000 раз меньше, чем коэффициент диффузии газа в газе [1, 2].

Из-за данного физического ограничения необходимо повышать совокупную скорость массопереноса за счёт увеличения межфазной поверхности.

Наиболее очевидный способ увеличения межфазной поверхности «газ-жидкость» – распыление жидкости на как можно более мелкие капли [3, 4]. С одной стороны, распыление жидкости на мелкие капли обеспечивает огромную межфазную поверхность по сравнению со всеми остальными способами формирования увеличенной поверхности (без фазового перехода). С другой стороны распыление жидкости для интенсификации массообменных процессов обладает недостатком, который заключается в малом объёмном содержании жидкости в газодисперсной системе. В этом случае жидкость очень быстро насыщается поглощаемым газом (несмотря на многократно увеличенную скорость массообмена на начальном этапе), и процесс прекращается. Поэтому далее рассматриваемый базовый физический принцип ускорения массообмена заключается в формировании устойчивых капиллярных волн на свободной поверхности «газ-жидкость» при объёме жидкости, значительно превышающем объём газа (когда в жидкость принудительно инжектируются барботажные пузырьки). Один из наиболее энергетически эффективных способов создания устойчивых капиллярных волн – формирование кавитационного режима при действии ультразвуковых колебаний на сплошную жидкую фазу [4, 5, 6, 7, 8]. Принципиальная возможность увеличения межфазной поверхности с помощью формирования капиллярных волн под действием ультразвуковых колебаний для случая принудительной инжекции барботажных пузырьков в жидкость экспериментально доказана в работе [9]. Способ, описанный в работе [9] (исследования проводились только для воды), заключается в создании схлопывающихся кавитационных микропузырьков (размером 0,0001...0,2 мм) вблизи границы раздела барботажных пузырьков (размером 1...5 мм). Ударные волны, формируемые схлопывающимися кавитационными пузырьками, способствуют формированию капиллярных волн на поверхности раздела «газ-жидкость». Энергетическая эффективность такого способа увеличения межфазной поверхности обусловлена тем, что волновое сопротивление жидкости многократно превышает волновое сопротивление газа [7], следовательно, в жидкость вводится увеличенная энергия ультразвуковых колебаний, переходящая в образование капиллярных волн. Для максимальной эффективности процесса необходимо развитие фундаментальных исследований в области гидромеханики жидкости, ограниченной поверхностью раздела с газовой средой, которые позволят:

- создать эффективные алгоритмы численного решения задачи для выявления оптимальных режимов и условий ультразвукового воздействия;
- углубить понимание механизмов процесса для разработки новых путей развития физических принципов ультразвукового воздействия;
- доказать утверждения существования, единственности решения и корректности подзадач гидромеханики жидкости, ограниченной поверхностью раздела.

Несмотря на то, что первые практические результаты, свидетельствующие об эффективности ультразвукового воздействия для формирования устойчивых капиллярных волн и ускорения поглощения газа жидкостью, были получены ещё в СССР в 1956 году (ультразвуковая интенсификация абсорбции паров бензола маслом, выполненная в Днепропетровском химико-технологическом институте [10]), основные фундаментальные исследования процесса и подпроцессов, его составляющих, проводились лишь последние 20 лет. Работы, выполненные в 1980, ..., 1990-х годах были направлены лишь на измерение параметров капиллярных волн [11] и свойств жидкости на основании данных о профиле капиллярных волн [12].

Одна из наиболее фундаментальных работ [13], посвящённая доказательству законов сохранения при формировании поверхностных волн на границе раздела «газ-жидкость» рассматривает формирование волн в приближении мелкой воды. Однако, поскольку в рассматриваемом процессе объём жидкости значительно превышает объём газового пузырька, теория

мелкой воды неприменима. В работе [14] изучены особенности взаимодействия разнонаправленных капиллярных волн между собой. В работах [15, 16, 17, 18, 19] приведены теоретические и экспериментальные исследования формирования капиллярных волн под действием ультразвуковых колебаний. Основная особенность данных работ [15, 16, 17, 18, 19] состоит в том, что учитывается специфика формирования волн при наложении на жидкую фазу вынуждающих механических колебаний ультразвуковой частоты.

В части формирования капиллярных волн под действием ультразвуковых колебаний особый интерес представляет работа [15], в которой предложен способ моделирования нелинейных поверхностных волн при возбуждении колебаний жидкости с помощью пьезоэлемента, основанный на разложении в ряд физических параметров жидкости по степеням плотности, энтропии и характерной амплитуды скорости смещения и решении полученной системы уравнений сохранения массы и импульса для коэффициентов разложения конечно-разностным методом 2-го порядка. В результате моделирования были найдены профили волн в пространственной области, разложение по частотному колебаний поверхности жидкости. Проведены экспериментальные исследования формируемых волн с помощью лазерного доплерографического виброметра. Полученные экспериментальные данные согласуются с теоретическими значениями. Поэтому, несмотря на то что представленная публикация не рассматривает диффузионные процессы (другой существенный фактор, влияющий на массоперенос газа в жидкости), она для развития гидромеханики поверхностных волн представляет методический интерес с точки зрения моделирования формирования капиллярных волн при возбуждении колебаний заданной поверхности на нерезонансных модах. Метод, описанный в представленной публикации, позволяет определить резонансную длину капиллярной волны, которая будет способна развиваться до больших амплитуд в линейном приближении. А затем на резонансной длине волны рассчитывается её развитие с помощью численного метода, описанного в работе [19]. Однако основным недостатком всех представленных работ, посвящённых формированию капиллярных волн под действием ультразвуковых колебаний, является рассмотрение только гармонического силового воздействия. В то время как при развитии кавитации в сплошной жидкой фазе создаётся множество ударных волн, каждая из которых близка к дельта-функции Дирака. При этом согласно имеющимся в открытых источниках публикациям первичное силовое воздействие считается гармоническим даже в большей части работ, посвящённых распаду капиллярных волн на капли [20, 21, 22, 23]. Кроме того, крайне мало уделяется внимания влиянию вязкости жидкости на формирование капиллярных волн, в то время как это существенный фактор, ограничивающий амплитуду волн (так, например, увеличение вязкости жидкости с 1 (близко к вязкости воды) до 4 (близко к вязкости спирта) мПа·с увеличивает потери на вязкое трение в 4 раза).

Всё это свидетельствует об отсутствии состоятельных теоретических моделей, описывающих основные механизмы увеличения межфазной поверхности под действием ультразвуковых колебаний. Таким образом, цель представленной работы заключается в создании теоретической модели, описывающей формирование капиллярных волн на поверхности «газ–жидкость» (поверхность крупного барботажного пузырька, по размерам значительно превышающего длину ультразвуковой волны и длину капиллярной волны) и позволяющей выявить усреднённое (по площади поверхности и за период ультразвуковых колебаний) увеличение межфазной поверхности в зависимости от амплитуды звукового давления вблизи межфазной поверхности и вязкости жидкости.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие частные задачи:

- сформулировать постановку задачи при внешнем силовом воздействии в виде отдельной пространственно-временной гармоник;
- построить точное решение задачи при внешнем силовом воздействии в виде отдельной пространственно-временной гармоник;

- доказать единственность решения задачи при внешнем силовом воздействии в виде отдельной пространственно-временной гармоник;
- сформулировать постановку задачи в обобщённых функциях для внешнего силового воздействия в виде линейной комбинации дельта-функций (ударные волны, формируемые при схлопывании кавитационных пузырьков);
- выявить зависимости профиля межфазной поверхности от амплитуды звукового давления и вязкости жидкости при внешнем силовом воздействии в виде линейной комбинации дельта-функций (ударные волны, формируемые при схлопывании кавитационных пузырьков).

Предложенная автором теоретическая модель согласно поставленной цели и задачам работы описана в следующих разделах.

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

В рамках поставленной задачи колебания межфазной поверхности возбуждаются за счёт пространственно распределённой силы, вызванной ударными волнами под действием схлопывающихся кавитационных пузырьков (рис. 1). Поскольку ударные волны, образуемые под действием кавитации, имеют широкий спектр, то первоначально было рассмотрено возбуждение колебаний межфазной поверхности при воздействии одной из гармоник, имеющей фиксированную пространственную длину волны и фиксированную частоту.

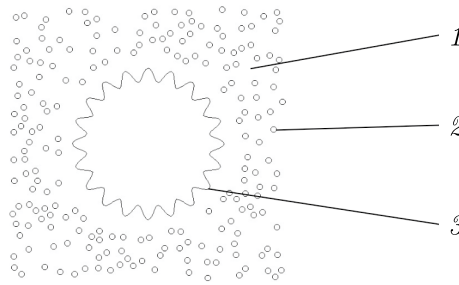


Рис. 1. Схематичное изображение возмущённого барботажного пузырька под действием кавитации:

1 — жидкость; 2 — кавитационные пузырьки; 3 — возмущённый барботажный пузырёк

Согласно предлагаемой постановке предполагается, что колебания поверхности являются достаточно небольшими по сравнению с длиной волны и уравнения динамики жидкости с граничными условиями могут быть линеаризованными. Особенностью предлагаемой постановки является учёт действия объёмной силы (которая близка к сосредоточенной), вызванной ударными волнами, образуемыми при схлопывании кавитационных пузырьков. Уравнения (1, 2) с условиями на границе $z = 0$ (3, 4, 5, 6) выглядят следующим образом:

$$\operatorname{div}(\mathbf{u}) = 0, \quad (1)$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla p - \nabla f - \eta \Delta \mathbf{u} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial h}{\partial t} = u_z, \quad (3)$$

$$-p + 2\eta \frac{\partial u_z}{\partial z} + \sigma \Delta h = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x} = 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial u_y}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial y} = 0 \quad (6)$$

где \mathbf{u} — вектор мгновенной скорости жидкости, м/с; ρ — плотность жидкости, кг/м³; t — время, с; p — мгновенное значение давления в жидкости, Па; f — потенциал объёмной силы, обусловленной схлопыванием кавитационного пузырька, Па; η — динамическая вязкость жидкости, Па·с; h — мгновенный профиль смещения межфазной поверхности, м; u_z — компонента мгновенной скорости движения жидкости по оси z , м/с; z — координата по оси z , м; σ — поверхностное натяжение жидкости, Н/м; u_x — компонента мгновенной скорости движения жидкости по оси x , м/с; x — координата по оси x , м; u_y — компонента мгновенной скорости движения жидкости по оси y , м/с; y — координата по оси y , м.

Первоначально был проведён гармонический анализ данных уравнений, который описан в следующем разделе.

2. ГАРМОНИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ УРАВНЕНИЙ

2.1. Вынужденные незатухающие колебания

При гармоническом анализе потенциал объёмной силы f был представлен как интеграл от гармоник (7). При этом рассматривались только коротковолновые гармоники, которые обеспечивают колебания поверхности с длиной волны, много меньшей радиуса барботажного пузырька (8).

$$f(x, y, z, t) = \iiint_{\Omega_{k,\omega}} F(k_x, k_y, k_z, \omega_s, x, y, z) e^{-I\omega_s t} dk_x dk_y dk_z d\omega_s, \quad (7)$$

$$\Omega_{k,\omega} = \mathbb{R}^4 \cap \overline{\{(k_x, k_y, k_z, \omega_s) \in \mathbb{R}^4 | (k_x^2 + k_y^2) < k_{\min}^2\}}, \quad (8)$$

$$F(k_x, k_y, k_z, \omega_s, x, y, z) = F_{k,\omega}(k_x, k_y, k_z, \omega_s) \exp\{Ik_x x + Ik_y y + Ik_z z\},$$

где F — комплексная амплитуда потенциала объёмной силы, обусловленной схлопыванием кавитационного пузырька, Па; k_x — компонента волнового числа по оси x , м⁻¹; k_y — компонента волнового числа по оси y , м⁻¹; k_z — компонента волнового числа по оси z , м⁻¹; ω_s — круговая частота, с⁻¹; I — мнимая единица; $\Omega_{k,\omega}$ — область значений параметров гармоники; k_{\min} — минимальное значение волнового числа, которым ограничивается сверху диапазон длин поверхностных волн в рамках постановки задачи, м⁻¹; \mathbb{R} — множество действительных чисел; $F_{k,\omega}$ — комплексная амплитуда отдельной пространственной гармоники потенциала объёмной силы, обусловленной схлопыванием кавитационного пузырька, Па.

Используя указанное представление, уравнения движения жидкости (9, 10) с граничными условиями (11, 12, 13, 14) выглядят следующим образом:

$$\operatorname{div}(\mathbf{U}) = 0, \quad (9)$$

$$\rho(-I\omega_s \mathbf{U}) + \nabla P - \nabla F - \eta \Delta \mathbf{U} = 0, \quad (10)$$

$$-I\omega_s H = U_z, \quad (11)$$

$$-P + 2\eta \frac{\partial U_z}{\partial z} + \sigma \Delta H = 0, \quad (12)$$

$$\frac{\partial U_x}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial x} = 0, \quad (13)$$

$$\frac{\partial U_y}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial y} = 0, \quad (14)$$

где \mathbf{U} — комплексная амплитуда (вектор) скорости движения жидкости, м/с; P — комплексная амплитуда давления жидкости, Па; H — комплексная амплитуда профиля смещения межфазной поверхности, м; U_z — комплексная амплитуда компоненты скорости движения жидкости

по оси z , м/с; U_x — комплексная амплитуда компоненты скорости движения жидкости по оси x , м/с; U_y — комплексная амплитуда компоненты скорости движения жидкости по оси y , м/с.

Чтобы исключить в уравнении сохранения импульса объёмную силу, проводилась замена $P - F \rightarrow P$. И в результате объёмная сила «переходила» в граничные условия (18):

$$\operatorname{div}(\mathbf{U}) = 0, \quad (15)$$

$$\rho(-I\omega_s \mathbf{U}) + \nabla P - \eta \Delta \mathbf{U} = 0, \quad (16)$$

$$-I\omega_s H = U_z, \quad (17)$$

$$-P + 2\eta \frac{\partial U_z}{\partial z} + \sigma \Delta H = F, \quad (18)$$

$$\frac{\partial U_x}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial x} = 0, \quad (19)$$

$$\frac{\partial U_y}{\partial z} + \frac{\partial U_z}{\partial y} = 0. \quad (20)$$

Если на функции P, \mathbf{U} наложить дополнительные условия (21, 23, 24, 25, 26, 27), то решение данной системы уравнений в области S (22) с граничными условиями существует и единственно.

$$\omega_s > 0, \quad (21)$$

$$S = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid z \geq 0\}, \quad (22)$$

$$\forall i = 1, \dots, 4 \left(\begin{pmatrix} P \\ U_x \\ U_y \\ U_z \end{pmatrix}, \mathbf{e}_i \right) \in C^\infty(S), \quad (23)$$

$$P(x + nX, y + mY, z) = P(x, y, z), \quad (24)$$

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \max_{(x, y) \in \mathbb{R}^2} |P| = 0, \quad (25)$$

$$\mathbf{U}(x + nX, y + mY, z) = \mathbf{U}(x, y, z), \quad (26)$$

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \max_{(x, y) \in \mathbb{R}^2} |\mathbf{U}| = 0, \quad (27)$$

$$n, m \in \mathbb{Z},$$

где S — область определения функций; \mathbf{e}_i — единичный вектор в \mathbb{R}^4 ; \mathbb{Z} — множество целых чисел.

Дополнительное условие для волнового числа гармоники связано с тем, что рассматриваются короткие волны, которые оказывают определяющее влияние на формирование межфазной поверхности согласно экспериментальным данным [9] и которые по своей длине малы по сравнению с радиусом кривизны невозмущённой поверхности. Для доказательства существования точного решения был использован метод комплексных амплитуд с использованием представлений колебательной скорости жидкости и профиля межфазной поверхности (28, 29).

$$\mathbf{U} = \mathbf{V} + \nabla \Phi, \quad (28)$$

$$\begin{pmatrix} H \\ U_x \\ U_y \\ U_z \end{pmatrix} = e^{Ik_x x + Ik_y y} \begin{pmatrix} H_A \\ V_{A,x} e^{-\alpha z} \\ V_{A,y} e^{-\alpha z} \\ V_{A,z} e^{-\alpha z} \end{pmatrix} + \Phi_A e^{Ik_x x + Ik_y y - kz} \begin{pmatrix} 0 \\ Ik_x \\ Ik_y \\ -k \end{pmatrix}, \quad (29)$$

где \mathbf{V} — комплексная амплитуда (вектор) вихревой составляющей скорости жидкости, м/с; Φ — комплексная амплитуда потенциала потенциальной составляющей скорости движения

жидкости, $\text{м}^2/\text{с}$; H_A — комплексная амплитуда пространственной гармоники профиля смещения межфазной поверхности, м ; $V_{A,x}$ — комплексная амплитуда пространственной гармоники компоненты вихревой составляющей скорости движения жидкости по оси x , $\text{м}/\text{с}$; α — комплексный коэффициент, характеризующий убыль амплитуды вихревой составляющей скорости вдоль оси z , м^{-1} ; $V_{A,y}$ — комплексная амплитуда пространственной гармоники компоненты вихревой составляющей скорости движения жидкости по оси y , $\text{м}/\text{с}$; $V_{A,z}$ — комплексная амплитуда пространственной гармоники компоненты вихревой составляющей скорости движения жидкости по оси z , $\text{м}/\text{с}$; Φ_A — комплексная амплитуда пространственной гармоники потенциала потенциальной составляющей скорости движения жидкости, $\text{м}^2/\text{с}$; k — модуль проекции волнового числа на плоскость Oxy , м^{-1} .

Согласно методу комплексных амплитуд задача сводится к решению следующей системы линейных алгебраических уравнений (30):

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & Ik_x & Ik_y & -\alpha \\ -\sigma k^2 & 2\eta k^2 - I\omega_s \rho & 0 & 0 & -2\eta\alpha \\ 0 & -2Ik_x k & -k & 0 & Ik_x \\ 0 & -2Ik_y k & 0 & -k & Ik_y \\ -I\omega_s & k & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_A \\ \Phi_A \\ V_{A,x} \\ V_{A,y} \\ V_{A,z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ F_{k,\omega} \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (30)$$

Как показано далее, матрица системы линейных алгебраических уравнений, имеет ненулевой определитель для любого действительного значения частоты ω_s (т. е. колебания без затухания). Если предположить, что определитель матрицы системы линейных уравнений равен нулю (31), то справедливо следующее уравнение 4-й степени (32), которое получается после возведения в квадрат радикалов в определителе.

$$\det \begin{pmatrix} 0 & 0 & Ik_x & Ik_y & -\alpha \\ -\sigma k^2 & 2\eta k^2 - I\omega_s \rho & 0 & 0 & -2\eta\alpha \\ 0 & -2Ik_x k & -k & 0 & Ik_x \\ 0 & -2Ik_y k & 0 & -k & Ik_y \\ -I\omega_s & k & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = 0, \quad (31)$$

$$(\Omega_s, \beta) = \left(\left(\frac{\rho \omega_s^2}{\sigma k^3} \right)^{1/2}, \left(\frac{\eta^2 k}{\rho \sigma} \right)^{1/2} \right)$$

\Downarrow

$$\Omega_s^4 - 4I\beta\Omega_s^3 + (4\beta^2 - 2)\Omega_s^2 + 1 = 0 \quad (32)$$

где Ω_s — безразмерная круговая частота; β — безразмерная вязкость жидкости.

В этом случае минимум модуля левой части уравнения должен быть равен нулю (33).

$$\min_{\Psi \geq 0} \left(16\xi\Psi^3 + (\Psi^2 + (4\xi - 2)\Psi + 1)^2 \right) = 0? \quad (33)$$

$$(\Psi, \xi) = (\Omega_s^2, \beta^2).$$

Поскольку функция, стоящая под знаком минимума, является полиномиальной с ненулевым коэффициентом при натуральной степени, то эта функция от Ψ является неограниченной на множестве неотрицательных действительных чисел. Причём для значения Ψ , большего некоторой положительной константы, эта функция строго больше положительной константы. Поэтому задача поиска глобального минимума функции сводится к задаче поиска минимума на отрезке $[0; C]$. На данном отрезке полином $\Psi^2 + (4\xi - 2)\Psi + 1$ может иметь только строго положительные корни среди действительных корней. Если действительных корней у полинома $\Psi^2 + (4\xi - 2)\Psi + 1$ нет, то минимум будет строго больше нуля автоматически. Если

действительные корни есть, то выбирается минимальный корень $\Psi_{min} > 0$. На интервале $[\frac{\Psi_{min}}{2}; C]$ полином $16\xi\Psi^3$ будет строго большим положительной константы. При этом полином $\Psi^2 + (4\xi - 2)\Psi + 1$ на отрезке $[0; \Psi_{min}/2]$ также будет строго большим положительной константы. Отсюда, следует, что минимум левой части уравнения (32) также будет строго большим нуля. Получается противоречие с предположением о существовании действительной частоты, при которой определитель матрицы СЛАУ равен 0. Следовательно, решение уравнений (15, 16) с граничными (17, 18, 19, 20) и дополнительными (21, 23, 24, 26) условиями существует.

Единственность решения доказывается методом от противного. Пусть существует 2 различных решения (\mathbf{U}_1, P_1) , (\mathbf{U}_2, P_2) . При этом для разности решений \mathbf{U}_d справедливо следующее интегральное соотношение (34) (черта сверху означает комплексное сопряжение). Далее из граничных условий (17, 18) следует интегральное соотношение (35). При этом учтено, что интеграл от подынтегрального выражения в правой части уравнения (34) по поверхности D_{side} равен нулю. Последнее следует из условия периодичности решения, поскольку на противоположных границах поверхности D_{side} , имеющей форму боковой стенки полубесконечного протяжённого параллелепипеда, векторы нормали направлены соответственно противоположно. В преобразованном уравнении в интеграле

$$\iint_{D_{top}} \sum_{i=1}^2 \frac{\partial \left(\overline{U_{d,3}} \frac{\partial U_{d,3}}{\partial x_i} \right)}{\partial x_i} dD_{top},$$

(D_{top} — квадратный участок поверхности «газ-жидкость») подынтегральное выражение представляет собой 2-мерную дивергенцию. Поскольку D_{top} является плоской поверхностью ($z = 0$), то интеграл

$$\iint_{D_{top}} \sum_{i=1}^2 \frac{\partial \left(\overline{U_{d,3}} \frac{\partial U_{d,3}}{\partial x_i} \right)}{\partial x_i} dD_{top} = \int_{\Gamma_{top}} \sum_{i=1}^2 \left(\overline{U_{d,3}} \frac{\partial U_{d,3}}{\partial x_i} n_{\Gamma,i} \right) d\Gamma_{top},$$

($n_{\Gamma,i}$ — компонента вектора нормали к линейной границе квадратного участка поверхности «газ-жидкость», лежащего на плоскости $z = 0$; Γ_{top} — линейная граница квадратного участка поверхности «газ-жидкость»). Интеграл также равен нулю, поскольку на противоположных отрезках границы Γ_{top} вектора \mathbf{n}_{Γ} (\mathbf{n}_{Γ} — вектор нормали к линейной границе квадратного участка поверхности «газ-жидкость», лежащий на плоскости $z = 0$) строго противоположны друг другу, и решение уравнения удовлетворяет условиям периодичности (24, 26). Поэтому уравнение (35) сводится к уравнению (36). В уравнении (36) левая часть является неотрицательной чисто действительной, а правая часть — чисто мнимой, при этом мнимое значение тоже является неотрицательным. Из этого следует, что левая и правая части уравнения равны нулю. Поскольку

$$\text{Im} \left(\iiint_{S_T} I\omega_s (\mathbf{U}_d, \overline{\mathbf{U}}_d) dx dy dz \right) \geq 0, \quad \text{Im} \left(\frac{I\sigma}{\omega_s} \iint_{D_{top}} \sum_{i=1}^2 \left(\frac{\partial \overline{U_{d,3}}}{\partial x_i} \frac{\partial U_{d,3}}{\partial x_i} \right) dD_{top} \right) \geq 0,$$

то

$$\iiint_{S_T} I\omega_s (\mathbf{U}_d, \overline{\mathbf{U}}_d) dx dy dz = 0.$$

Знак $(\mathbf{a}, \overline{\mathbf{b}})$ означает скалярное произведение в пространстве над полем комплексных чисел \mathbb{C}^3 .

$$\iiint_{S_T} \left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\left(\frac{\partial \overline{U_{d,i}}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U_{d,j}}}{\partial x_i} \right) \Sigma_{i,j} \right) - I\omega_s (\mathbf{U}_d, \overline{\mathbf{U}}_d) \right) dx dy dz = \iint_{D_T} (\overline{\mathbf{U}}_d, \Sigma \mathbf{n}) dD_T, \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \iiint_{S_T} \left(\frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\left(\frac{\partial \overline{U_{d,i}}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{U_{d,j}}}{\partial x_i} \right) \Sigma_{i,j} \right) - I\omega_s (\mathbf{U}_d, \overline{\mathbf{U}}_d) \right) dx dy dz \\ = \frac{\sigma}{I\omega_s} \iint_{D_{top}} \sum_{i=1}^2 \frac{\partial \left(\overline{U_{d,3}} \frac{\partial U_{d,3}}{\partial x_i} \right)}{\partial x_i} dD_{top} + \frac{I\sigma}{\omega_s} \iint_{D_{top}} \sum_{i=1}^2 \left(\frac{\partial \overline{U_{d,3}}}{\partial x_i} \frac{\partial U_{d,3}}{\partial x_i} \right) dD_{top}, \end{aligned} \quad (35)$$

$$\begin{aligned} \iiint_{S_T} \frac{1}{2} \eta \sum_{i,j} \left(\left(\frac{\partial U_{d,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial U_{d,j}}{\partial x_i} \right) \overline{\left(\frac{\partial U_{d,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial U_{d,j}}{\partial x_i} \right)} \right) dx dy dz \\ = \iint_{S_T} I\omega_s (\mathbf{U}_d, \overline{\mathbf{U}}_d) dx dy dz + \frac{I\sigma}{\omega_s} \iint_{D_{top}} \sum_{i=1}^2 \left(\frac{\partial \overline{U_{d,3}}}{\partial x_i} \frac{\partial U_{d,3}}{\partial x_i} \right) dD_{top} \end{aligned} \quad (36)$$

$$\Sigma_{i,j} = -P_d \delta_{i,j} + \eta \left(\frac{\partial U_{d,i}}{\partial x_j} + \frac{\partial U_{d,j}}{\partial x_i} \right),$$

$$S_T = [0; X] \times [0; Y] \times [0; \infty],$$

$$D_{top} = [0; X] \times [0; Y] \times \{0\},$$

$$D_{side} = ([0; X] \times \{0\}) \cup ([0; X] \times \{Y\}) \cup (\{0\} \times [0; Y]) \cup (\{X\} \times [0; Y]) \times [0; \infty),$$

$$D_T = D_{top} \cup D_{side}$$

где $\Sigma_{i,j}$ — компонента тензора напряжений жидкости, Па; Σ — тензор напряжений жидкости, Па; \mathbf{n} — вектор внешней нормали к границе области.

Так как

$$\iiint_{S_T} I\omega_s (\mathbf{U}_d, \overline{\mathbf{U}}_d) dx dy dz = 0,$$

из непрерывности функции \mathbf{U}_d следует, что функция \mathbf{U}_d равна нулю на всей рассматриваемой области. Там образом, единственность решения доказана.

Поскольку внешнее силовое воздействие в виде ударной волны представляет собой короткий и локализованный импульс, который может быть представлен в виде дельта-функции Дирака, далее приведена постановка задачи в терминах обобщённых функций.

3. ОБОБЩЁННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ

3.1. Постановка задачи в терминах обобщённых функций

При постановке задачи в терминах обобщённых функций предполагается, что на возмущение межфазной поверхности влияют схлопывающиеся кавитационные пузырьки, которые возникают случайным образом в различных местах в каждый период ультразвуковых колебаний. Предполагается, что в каждый период колебаний в рассматриваемой расчётной области возникает не более одного схлопывающегося кавитационного пузырька. При этом пузырьки могут находиться в положениях из множества $[x_{\min}; x_{\max}] \times [y_{\min}; y_{\max}] \times [z_{\min}; z_{\max}]$ ($z_{\min} > 0; z_{\max} > z_{\min}; y_{\max} > y_{\min}; x_{\max} > x_{\min}$).

Далее вводятся обозначения:

$$\Omega_{\text{bub}} = [0; 1], \quad M : \mathbb{Z} \rightarrow \Omega_{\text{bub}},$$

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{\text{bub}} : \Omega_{\text{bub}} &\rightarrow ([x_{\min}; x_{\max}] \times [y_{\min}; y_{\max}] \times [z_{\min}; z_{\max}]), \quad \mathbf{r}_{\text{bub}} = \begin{pmatrix} x_{\text{bub}} \\ y_{\text{bub}} \\ z_{\text{bub}} \end{pmatrix}, \\ \varphi_n &\in C_0^\infty(\mathbb{R}^n), \quad L_{4,3} : C_0^\infty(\mathbb{R}^4) \rightarrow C_0^\infty(\mathbb{R}^3), \quad L_{4,3}[\varphi_4(t, x, y, z)] = \varphi_3(t, x, y), \\ \varphi_3(t, x, y) &= \varphi_4(t, x, y, 0), \quad \vec{\varphi}_4 = \begin{pmatrix} \varphi_{4,1} \\ \varphi_{4,2} \\ \varphi_{4,3} \end{pmatrix}, \\ V_{\text{bub}} &= (x_{\max} - x_{\min})(y_{\max} - y_{\min})(z_{\max} - z_{\min}), \quad P_{\text{bub}} = n_{\text{bub}} V_{\text{bub}} \end{aligned}$$

где Ω_{bub} — континуальное множество элементарных исходов при схлопывании кавитационного пузырька; M — функция, характеризующая случайный процесс схлопывания кавитационных пузырьков; \mathbf{r}_{bub} — функция, определяющая положения кавитационных пузырьков; φ_n — основная функция в пространстве \mathbb{R}^n ; $L_{4,3}$ — проектор основной функции на пространстве \mathbb{R}^4 в функцию на пространстве \mathbb{R}^3 ; $\vec{\varphi}_4$ — трёхмерный вектор основных функций от 4-х аргументов (t, x, y, z) ; V_{bub} — объём области возможного появления кавитационного пузырька, м^3 ; P_{bub} — вероятность возникновения схлопывающегося кавитационного пузырька за 1 период колебаний; n_{bub} — концентрация кавитационных пузырьков, м^{-3} .

С использованием данных обозначений задача в терминах обобщённых функций формулируется следующим образом.

$$(\text{div}(\mathbf{u}), q) = \left(-\frac{\partial h}{\partial t}, L_{4,3}[q] \right), \quad (37)$$

$$\left(\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \nabla p - \eta \Delta \mathbf{u}, \vec{\varphi}_4 \right) = (\sigma \Delta h - f, L_{4,3}[\varphi_{4,3}]) \quad (38)$$

где q — основная функция в пространстве \mathbb{R}^4 .

Профиль поверхности h является линейным непрерывным функционалом над 3-мерным пространством основных функций $C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$, а компоненты вектора скорости u_i и давление p являются линейными непрерывными функционалами над 4-мерным пространством основных функций $C_0^\infty(\mathbb{R}^4)$. Если функция f является гармонической по координатам и времени, то решением данных уравнений (37, 38) являются регулярные обобщённые функции. Для случая схлопывания пузырьков функция f представляется следующим образом (41):

$$\begin{aligned} (\mathbf{s}, \mathbf{s}_{\text{bub}}(i), \mathbf{k}_2) &= \left(\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} x_{\text{bub}} \left(L_1 \left(\frac{M(i)}{P_{\text{bub}}} \right) \right) \\ y_{\text{bub}} \left(L_1 \left(\frac{M(i)}{P_{\text{bub}}} \right) \right) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} k_x \\ k_y \end{pmatrix} \right), \\ G(i, x, y) &= \iiint_{k_z \in \mathbb{R}, k_x^2 + k_y^2 \geq k_{\min}^2} \frac{e^{I(\mathbf{k}_2, \mathbf{s} - \mathbf{s}_{\text{bub}}(i)) - k_z z_{\text{bub}} \left(L_1 \left(\frac{M(i)}{P_{\text{bub}}} \right) \right)}}{8\pi^3 k_{\text{total}}^2} dk_x dk_y dk_z, \end{aligned} \quad (39)$$

$$\varphi_{3,3} = L_{4,3}[\varphi_{4,3}], \quad (40)$$

$$(f, \varphi_{3,3}) = - \sum_{i=-\infty}^{\infty} \iint_{\mathbb{R}^2} W_{\text{bub}} J_1 \left(\frac{M(i)}{P_{\text{bub}}} \right) G(i, x, y) \varphi_{3,3}(iT, x, y) dx dy \quad (41)$$

где L_1 — функция, равная 1, если аргумент больше 1 и самому аргументу в противном случае; k_{total} — модуль волнового числа, м^{-1} ; W_{bub} — коэффициент пропорциональности, определяющий энергию ударной волны при схлопывании одного кавитационного пузырька, $\text{Н}/\text{м}^4$; J_1 — функция-индикатор, равная 1, если аргумент меньше 1 и 0 в противном случае; T — период ультразвуковых колебаний, с.

Далее показано, что функция $G(i, x, y)$ бесконечно дифференцируема по x, y после проведения следующих преобразований (42) интеграла

$$\iiint_{k_z \in \mathbb{R}, k_x^2 + k_y^2 \geq k_{\min}^2} \frac{e^{I((\mathbf{k}_2, \mathbf{s} - \mathbf{s}_{\text{bub}}(i)) - k_z z_{\text{bub}}(L_1(\frac{M(i)}{P_{\text{bub}}}))}}{8\pi^3 k_{\text{total}}^2} dk_x dk_y dk_z$$

с использованием теории вычетов и леммы Жордана.

$$\begin{aligned} & \iiint_{k_z \in \mathbb{R}, k_x^2 + k_y^2 \geq k_{\min}^2} \frac{e^{I((\mathbf{k}_2, \mathbf{s} - \mathbf{s}_{\text{bub}}(i)) - k_z z_{\text{bub}}(L_1(\frac{M(i)}{P_{\text{bub}}}))}}{8\pi^3 k_{\text{total}}^2} dk_x dk_y dk_z \\ &= \frac{1}{8\pi^3} \iint_{\|\mathbf{k}_2\|^2 \geq k_{\min}^2} e^{I(\mathbf{k}_2, \mathbf{s} - \mathbf{s}_{\text{bub}}(i))} \int_{k_z \in \mathbb{R}} \frac{e^{-Ik_z z_{\text{bub}}(L_1(\frac{M(i)}{P_{\text{bub}}}))}}{\|\mathbf{k}_2\|^2 + k_z^2} dk_z dk_x dk_y \\ &= -\frac{1}{8\pi^2} \iint_{\|\mathbf{k}_2\|^2 \geq k_{\min}^2} e^{I(\mathbf{k}_2, \mathbf{s} - \mathbf{s}_{\text{bub}}(i))} \frac{e^{-\|\mathbf{k}_2\| z_{\text{bub}}(L_1(\frac{M(i)}{P_{\text{bub}}}))}}{\|\mathbf{k}_2\|} dk_x dk_y. \quad (42) \end{aligned}$$

Далее бесконечная дифференцируемость функции $G(i, x, y)$ следует из равномерной сходимости интеграла

$$\iint_{\|\mathbf{k}_2\|^2 \geq k_{\min}^2} e^{I(\mathbf{k}_2, \mathbf{s} - \mathbf{s}_{\text{bub}}(i))} \frac{e^{-\|\mathbf{k}_2\| z_{\text{bub}}(L_1(\frac{M(i)}{P_{\text{bub}}}))}}{\|\mathbf{k}_2\|} dk_x dk_y$$

при взятии частной производной любого целого порядка с любым мультииндексом от подынтегрального выражения. Равномерная сходимость связана с тем, что любая частная производная подынтегрального выражения представляет собой полином от \mathbf{k}_2 , умноженный на комплексную функцию, модуль которой экспоненциально убывает при норме \mathbf{k}_2 , стремящейся к плюс бесконечности.

3.2. Физический смысл построенных уравнений в обобщённых функциях

Построенные уравнения в обобщённых функциях сводятся к уравнениям сохранения массы и импульса в дифференциальной форме при выше заданных кинематическом и динамическом граничном условии, если объёмный источник силы f будет представлять регулярную обобщённую функцию вместе с регулярными её производными произвольного целого порядка. При этом использованное в поставленной задаче представление для силы (41) эквивалентно случаю, когда в каждый период первичного ультразвукового воздействия схлопывается не более одного кавитационного пузырька с вероятностью $n_{\text{bub}} V_{\text{bub}}$. Согласно предлагаемой постановке каждый акт схлопывания кавитационного пузырька соответствует объёмной потенциальной силе, лапласиан от которой равен дельта-функции Дирака. При этом, поскольку не рассматриваются длинные волновые возмущения поверхности, часть гармоник объёмной потенциальной силы «отбрасывается».

На основании преобразования Фурье для обобщённых функций силы (41), решения СЛАУ (30) и признака сходимости Дирихле для интегралов, возникающих при обратном преобразовании Фурье, было показано, что профиль межфазной поверхности является регулярной обобщённой функцией h . Найденный профиль межфазной поверхности позволяет оценить относительное увеличение межфазной поверхности согласно следующему выражению (43) (величина h представляется как «обычная» функция). Интегрирование в выражении (43) понимается

в смысле главного значения по Коши.

$$K_{\text{rel}} = \frac{\iiint_{(\mathbf{s} \in [x_{\min}; x_{\max}] \times [y_{\min}; y_{\max}]), (t \in [0; T])} (1 + \|\nabla h\|^2)^{1/2} dx dy dt}{T(x_{\max} - x_{\min})(y_{\max} - y_{\min})} \quad (43)$$

где K_{rel} – относительное увеличение межфазной поверхности.

Далее на основании закона сохранения энергии (элементарный акт схлопывания кавитационного пузырька приводит к тому, что жидкость приобретает дополнительную кинетическую энергию) были выявлены оценочные зависимости увеличения межфазной поверхности, которые приведены в следующем разделе.

4. ОЦЕНОЧНЫЕ ЗАВИСИМОСТИ УВЕЛИЧЕНИЯ ПЛОЩАДИ МЕЖФАЗНОЙ ПОВЕРХНОСТИ

Зависимости выявлялись для жидкости с плотностью 1000 кг/м^{-3} , поверхностным натяжением $0,072 \text{ Н/м}$. Частота ультразвуковых колебаний равнялась 22 кГц . При построении зависимостей учитывалась зависимость концентрации кавитационных пузырьков от амплитуды звукового давления. Использовалась феноменологическая модель формирования кавитационной области для определения концентрации кавитационных пузырьков, приведённая в работе [24]. При оценке энергии, переходящей в увеличение межфазной поверхности, коэффициент W_{bub} умножался дополнительно на поправочный коэффициент, учитывающий переход части энергии при схлопывании кавитационных пузырьков в тепло. На рис. 2 приведена оценочная зависимость усреднённого увеличения межфазной поверхности от амплитуды звукового давления.

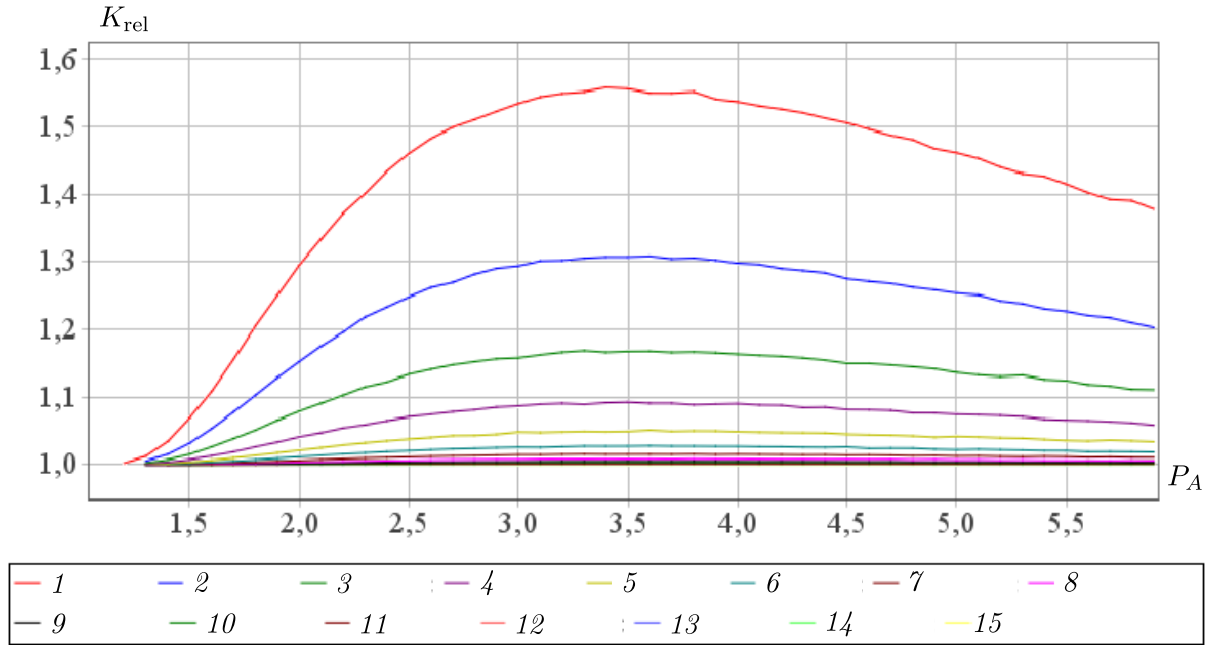


Рис. 2. Оценочная зависимость усреднённого увеличения межфазной поверхности от амплитуды звукового давления;
 K_{rel} – относительное увеличение межфазной поверхности;

P_A – амплитуда звукового давления вблизи межфазной поверхности (атм):

- 1 – 0,4 мПа·с; 2 – 2,0 мПа·с; 3 – 3,6 мПа·с; 4 – 5,2 мПа·с; 5 – 6,8 мПа·с; 6 – 8,4 мПа·с;
 7 – 10,0 мПа·с; 8 – 11,6 мПа·с; 9 – 13,2 мПа·с; 10 – 14,8 мПа·с; 11 – 16,4 мПа·с;
 12 – 18,0 мПа·с; 13 – 19,6 мПа·с; 14 – 21,2 мПа·с; 15 – 22,8 мПа·с

Представленные зависимости свидетельствуют о том, что увеличение межфазной поверхности достигает 1,5 и более раз, что близко к экспериментальным данным, полученных методом скоростной киносъёмки [9].

Сравнение с экспериментальными данными производилось путём оценки отношения амплитуды капиллярной волны к её длине ($\frac{A}{\lambda}$) по контуру изображения проекции газового пузырька и выявления площади межфазной поверхности согласно следующему выражению:

$$\frac{1}{4\pi^2} \iint_{(x,y) \in [0;2\pi] \times [0;2\pi]} \sqrt{1 + \left(2\pi \frac{A}{\lambda}\right)^2 (\cos^2(x)\sin^2(y) + \sin^2(x)\cos^2(y))} dx dy \quad (44)$$

Согласно представленному экспериментальному изображению (рис. 3) достигнутое увеличение межфазной поверхности только за счёт формирования капиллярных волн составляет около 1.4...1.45 раз.

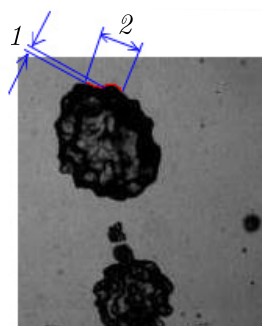


Рис. 3. Экспериментальное изображение проекции барботажного пузырька:
1 — амплитуда волны; 2 — длина волны

В работе [9] итоговое увеличение межфазной поверхности достигает большего значения за счёт дробления барботажных пузырьков (в данной работе рассматриваются волны только на поверхности отдельного пузырька).

Полученные зависимости межфазной поверхности от вязкости (рис. 4) свидетельствуют о существовании предельной вязкости, начиная с которой эффект прекращается.

Предельное значение вязкости (от 6 до 10 мПа·с) соотносится с экспериментальными данными, полученными методами скоростной киносъёмки на базе Института гидродинамики М. А. Лаврентьева СО РАН (рис. 5).

Это свидетельствует о необходимости проведения исследований при различных температурах среды. Поскольку с одной стороны, при повышении температуры снижается вязкость, а с другой стороны уменьшается степень развитости кавитации. По всей видимости, в связи с этим может существовать оптимальная температура, при которой достигается максимальная степень увеличения межфазной поверхности.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложена модель формирования линейных коротких капиллярных волн на поверхности «газ–жидкость» под действием кавитации, создаваемой ультразвуковыми колебаниями. Построены уравнения распространения капиллярных волн в формулировке классических и обобщённых функций, которые учитывают: вязкость жидкой фазы; затухание колебаний волн со времени за счёт вязкости жидкой фазы, из которого следует ограниченность амплитуды волн (несмотря на то, что при отсутствии затухания волна может совершать колебания во времени неограниченно долго). Доказано существование и единственность решения уравнений в классической формулировке при гармонической внешней силе, инициирующей формирование волн.

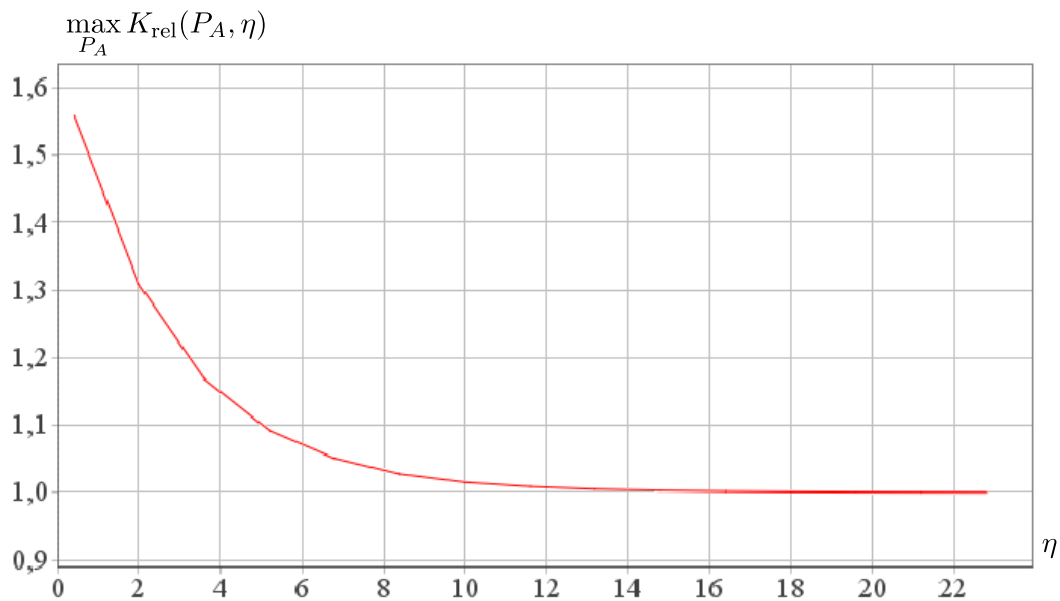


Рис. 4. Оценочная зависимость максимального увеличения межфазной поверхности от вязкости;

K_{rel} — относительное увеличение межфазной поверхности;

P_A — амплитуда звукового давления вблизи межфазной поверхности;

η — динамическая вязкость (мПа·с)

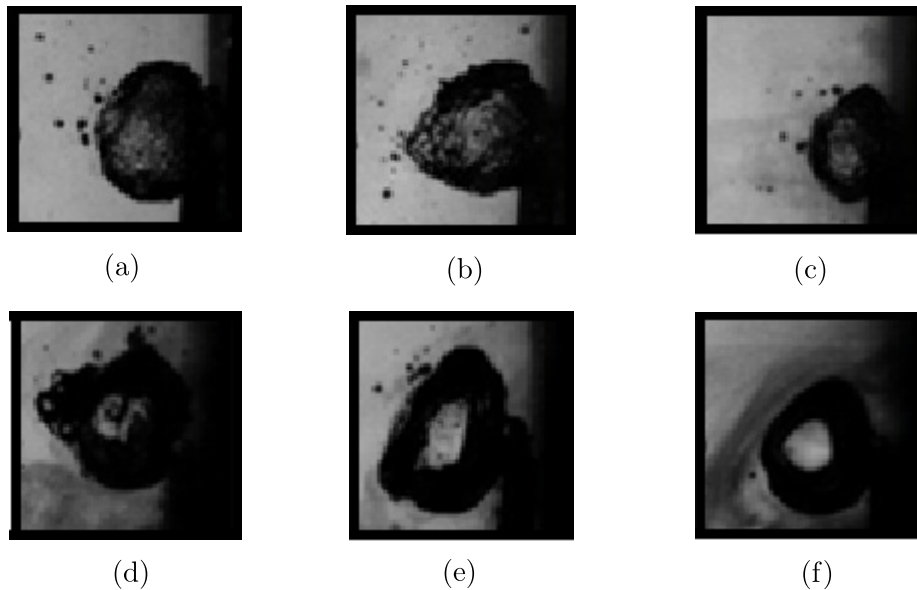


Рис. 5. Оценочная зависимость максимального увеличения межфазной поверхности от вязкости:

1,0 мПа·с (a); 1,5 мПа·с (b); 4,0 мПа·с (c); 7,4 мПа·с (d); 12,7 мПа·с (e); 25,1 мПа·с (f)

Установлено, что для уравнений в обобщённых функциях для случая схлопывания множества пузырьков в ограниченном объёме жидкости профиль смещения межфазной поверхности является регулярной обобщённой функцией. Построены оценочные зависимости усреднённого увеличения межфазной поверхности от параметров ультразвукового воздействия и вязкости жидкости. Зависимости показали увеличение межфазной поверхности до 1,5 раз и более для жидкости, по вязкости близкой к воде. Полученное значение близко к экспериментальным дан-

ным. Установлено существование предельной вязкости, начиная с которой эффект перестаёт быть заметным. Это свидетельствует о необходимости проведения исследований при различных температурах среды. Поскольку с одной стороны, при повышении температуры системы «газ–жидкость» снижается вязкость жидкой фазы, а с другой стороны уменьшается степень развитости кавитации. По всей видимости, в связи с этим может существовать оптимальная температура для достижения максимального увеличения межфазной поверхности.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 23-12-00278, <https://rscf.ru/project/23-12-00278/>). 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. Новосёлов А.Г., Дужий А.Б., Голикова Е.Ю. Молекулярная диффузия газов в жидкости. Коэффициенты молекулярной диффузии диоксида углерода в воде // Научн. журн. НИУ ИТМО. Сер. Процессы и аппараты пищевых производств. 2014. № 2.
2. Подрыга В.О., Вихров Е.В., Поляков С.В. Молекулярно-динамический расчёт коэффициента диффузии газов на примере аргона, азота, водорода, кислорода, метана и углекислого газа // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2019. № 96.
3. Шадрин Е.Ю., Ануфриев И.С., Шарыпов О.В. Исследование процесса распыления и сжигания водоугольного топлива с использованием пневматической форсунки // Прикл. математика и техн. физика. 2021. Т. 62, № 3. С. 165–171.
4. Khmelev V.N., Shalunov A.V., Golykh R.N., Nesterov V.A., Dorovskikh R.S., Shalunova A.V. Determination of the modes and the conditions of ultrasonic spraying providing specified productivity and dispersed characteristics of the aerosol // J. Appl. Fluid Mech. 2017. V. 10, N 5. P. 1409–1419.
5. Розенберг Л.Д. Физические основы ультразвуковой технологии. М.: Наука, 1970.
6. Golykh R.N. Evaluation of optimum modes and conditions of cavitation and acoustic absorption intensification for increasing // J. Appl. Fluid Mech. 2017. V. 10, N 5. P. 1235–1246.
7. Розенберг Л.Д. Мощные ультразвуковые поля. М.: Наука, 1968.
8. Morton J., Khavari M., Priyadarshi A., Kaur A., Grobert N., Mi J., Porfyrakis K., Prentice P., Eskin D., Tzanakis I. Dual frequency ultrasonic cavitation in various liquids: high-speed imaging and acoustic pressure measurements // Phys. Fluids. 2023. V. 35.
9. Голых Р.Н., Карра Ж.-Б., Хмелёв В. Н., Маняхин И.А., Минаков В.Д., Генне Д.В., Барсуков А.Р. Влияние ультразвукового кавитационного воздействия на межфазную поверхность «газ–жидкость» при принудительной аэрации // Прикл. математика и техн. физика. 2024. Т. 65, № 6. С. 83–98.
10. Мальцев Н.Н. Абсорбция бензола и возможность её интенсификации воздействием ультразвука. Днепропетровск: Днепропетровский химико-технологический институт им. Ф.Э. Дзержинского, 1956.
11. Bonn D., Wegdam G. Capillary waves and ellipsometry experiments // J. Phys. I France. 1992. V. 19, N 19. P. 1755–1764.
12. Wallenberger P., Lyzenga D.R. Measurement of the surface tension of water using microwave backscatter from gravity-capillary waves // IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing. 1990. V. 28, N 6. P. 1012–1016.
13. Остапенко В.В. О законах сохранения теории мелкой воды // Докл. АН. 2015. Т. 464, № 5. С. 558–561.

14. *Punzmann H., Shats M., Xia H.* Phase randomization of three-wave interactions in capillary waves // *Phys. Rev. Lett.* 2009. Iss. 103. P. 26946.
15. *Tan M., Friend J., Matar O., Yeo L.* Capillary wave motion excited by high frequency surface acoustic waves // *Phys. Fluids.* 2023. Iss. 22. P. 112112.
16. *Rahimzadeh A., Ahmadian Y.M.R., Eslamian M.* Experimental study on the characteristics of capillary surface waves on a liquid film on an ultrasonically vibrated substrate // *Fluid Dynamics Research.* 2018. Iss. 50.
17. *Xu J., Attinger D.* Acoustic excitation of superharmonic capillary waves on a meniscus in a planar micro-geometry // *Phys. Fluids.* 2009. Iss. 19.
18. *Shen L., Denner F., Morgan N., Wachem B., Dini D.* Capillary waves with surface viscosity // *J. Fluid Mech.* 2018. Iss. 847. P. 644–663.
19. *Schmidmayer K., Petitpas F., Daniel E., Favrie N., Gavriluk S.* A model and numerical method for compressible flows with capillary effects // *J. Comput. Phys.* 2017. Iss. 334. P. 468–496.
20. *Taller D., Go D.* Modulated exponential films generated by surface acoustic waves and their role in liquid wicking and aerosolization at a pinned drop // *Phys. Rev. E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Phys.* 2013. Iss. 87. P. 53004.
21. *Simon J.C., Sapozhnikov O.A., Khokhlova V.A., Crum L.A., Bailey M.R.* Ultrasonic atomization of liquids in drop-chain acoustic fountains // *J. Fluid Mech.* 2015. Iss. 766. P. 129–146.
22. *Sugondo A., Sutrisno T., Anggono W., Anne O.* Effect of frequency on droplet characteristics in ultrasonic atomization process // *E3S Web of Conf.* 2019. Vol. 19. P. 1002.
23. *Ehrhorn J., Semke W.* Numerical prediction of vibration induced liquid atomization // *Inter. J. Nov. Res. Engrg. & Pharm. Sci.* 2014. V. 1, Iss. 3. P. 1–9.
24. *Golykh R., Shalunov A., Khmelev V., Lopatin R., Minakov V., Shakura V.* Evaluation of optimum modes and conditions providing increasing ultrasonic cavitation area in high-viscous and non-newtonian fluids // *Romanian J. Acoustics and Vibration.* 2020. V. 17, N 2. P. 101–108.

UDC 534-8

**THE MODEL OF THE FORMATION OF SHORT CAPILLARY WAVES
ON THE «LIQUID-GAS» INTERFACE UNDER INFLUENCE OF
PULSED SHOCK DISTURBANCES DUE TO ULTRASONIC
CAVITATION**

© 2025 R. N. Golykh^{1a}, J.-B. Carrat^{2b}

¹*Biysk Technological Institute (branch) of Polzunov Altai State Technical University,
ul. Hero of Soviet Union Trofimov, 27, Biysk 659305, Russia,*

²*Lavrentyev Institute of Hydrodynamics SB RAS,
Prosp. Acad. Lavrentieva, 15, Novosibirsk 630090, Russia*

E-mails: ^aromangl90@gmail.com, ^bjb.carrat@gmail.com

Received 23.10.2024, revised 05.06.2025, accepted 17.09.2025

Abstract. The paper presents the model of the formation of linear short capillary waves on the gas-liquid surface in an unlimited volume of liquid under the action of shock waves generated by the collapse of microscopic (0.0001...0.2 mm) cavitation bubbles formed by ultrasonic vibrations. The interfacial surface (gas-liquid surface) is the boundary of the large air bubble (1...5 mm in size) formed by forced injection of gas into a liquid. The size of air bubble significantly exceeds the size of the cavitation bubble and the length of the capillary wave. To evaluate the profile of the interfacial surface, the equations of capillary wave propagation were constructed using the formulation of classical and generalized functions. The equations take into account the viscosity of the liquid phase; the attenuation of wave vibrations over time due to the viscosity of the liquid phase, which implies a limited amplitude of the waves (despite the fact that in the absence of attenuation, the wave can oscillate indefinitely). The existence and uniqueness of the solution of the equations in the classical formulation with a harmonic external force initiating the formation of waves is proved. The paper presents, that for equations in generalized functions for the case of the collapse of a ensemble of bubbles in a limited volume of liquid, the displacement profile of the interfacial surface is a regular generalized function. Estimated dependences of the average increase in the interfacial surface on the parameters of ultrasonic action and the viscosity of the liquid were constructed. The dependences showed an increase in the interfacial surface to 1.5 times or more for a liquid with a viscosity not exceeding that of water. The obtained value is similar to the experimental data. The existence of a limiting viscosity has been evaluated. From the limiting viscosity, the effect is reduced to almost zero. This indicates the need to perform research at different around temperatures. Because, on the one hand, as the temperature increases, the viscosity of the liquid phase is decreased, and on the other hand, the degree of cavitation is decreased. Apparently, in this regard, there may be an optimal temperature for increasing the interfacial surface due to the formation of capillary waves.

Keywords: cavitation, ultrasonic, oscillations, capillary wave, model.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2025.28.304

REFERENCES

1. Novoselov A.G., Dujij A.B., Golikova E.Yu. Molekulyarnaya diffuziya gazov v zhidkosti. Koeffitsienty molekulyarnoy diffuzii dioksida ugleroda v vode [Molecular diffusion of gases in a liquid. Coefficients of molecular diffusion of carbon dioxide in water]. *Nauchnyy zhurn. NIU ITMO. Ser. Protsessy i apparaty*

- pischevykh proizvodstv* [Sci. J. NRU ITMO. Ser. Processes and devices of food production], 2014, No. 2 (In Russian).
2. Podryga V.O., Vikhrov E.V., Polyakov S.V. Molekulyarno-dinamicheskiy raschet koeffitsienta diffuzii gazov na primere argona, azota, vodoroda, kisloroda, metana i uglekislogo gaza [Molecular dynamic calculation of the gas diffusion coefficient on the example of argon, nitrogen, hydrogen, oxygen, methane and carbon dioxide]. *Preprinty IPM im. M. V. Keldysha* [Preprints of IPM named after M. V. Keldysh], 2019, No. 96 (In Russian).
 3. Shadrin E.Y., Anufriev I.S., Sharypov O.V. Issledovanie protsessa raspyleniya i szhiganiya vodougol'nogo topliva s ispol'zovaniem pnevmaticheskoy forsunki [Investigation of the process of spraying and burning coal-water fuel using a pneumatic nozzle]. *Priklad. Matem. Tekhnic. Fizika* [Appl. Math. Engrg. Phys.], 2021, V. 62, No. 3, pp. 165–171 (In Russian).
 4. Khmelev V.N., Shalunov A.V., Golykh R.N., Nesterov V.A., Dorovskikh R.S., Shalunova A.V. Determination of the modes and the conditions of ultrasonic spraying providing specified productivity and dispersed characteristics of the aerosol. *J. Appl. Fluid Mech.*, 2017, V. 10, No. 5, pp. 1409–1419.
 5. Rozenberg L.D. Fizicheskie osnovy ul'trazvukovoy tekhnologii [Phys. foundations of ultrasonic technol.]. Moscow: Nauka, 1970 (In Russian).
 6. Golykh R.N. Evaluation of Optimum Modes and Conditions of Cavitation and Acoustic Absorption Intensification for Increasing. *J. Appl. Fluid Mech.*, 2017, V. 10, No. 5, pp. 1235–1246.
 7. Rozenberg L.D. Moschnye ul'trazvukovye polya [Powerful ultrasonic fields]. Moscow: Nauka, 1968 (In Russian).
 8. Morton J., Khavari M., Priyadarshi A., Kaur A., Grobert N., Mi J., Porfyrakis K., Prentice P., Eskin D., Tzanakis I. Dual frequency Ultrasonic Cavitation in Various Liquids: High-Speed Imaging and Acoustic Pressure Measurements. *Phys. Fluids*, 2023, Vol. 35.
 9. Golykh R.N., Carrat J.-B., Khmelev V.N., Manyakhin I.A., Minakov V.D., Genne D.V., Barsukov A.R. Vliyanie ul'trazvukovogo kavitatsionnogo vozdeystviya na mezhfaznuyu poverkhnost' «gaz-zhidkost'» pri prinuditel'noy aeratsii [Influence Of Ultrasonic Cavitation Influence On Interphase Surface «Gas-Liquid» At Forced Aeration]. *Priklad. Matem. Tekhnic. Fizika* [Appl. Math. Engrg. Phys.], 2024, Vol. 65, No. 6, pp. 83–98 (In Russian).
 10. Maltsev N.N. Absorbtsiya benzola i vozmozhnost' ee intensifikatsii vozdeystviem ul'trazvuka [Absorption of benzene and the possibility of its intensification by ultrasound]. Dnepropetrovsk: Dnepropetrovskiy khimiko-tekhnologicheskii institut im. F.E. Dzerzhinskogo, 1956 (In Russian).
 11. Bonn D., Wegdam G. Capillary Waves and Ellipsometry Experiments. *J. Phys. I France*, 1992, Vol. 19, No. 19, pp. 1755–1764.
 12. Wallenberger P., Lyzenga D.R. Measurement of the surface tension of water using microwave backscatter from gravity-capillary waves. *IEEE Transactions on Geoscience and Remote Sensing*, 1990, Vol. 28, No. 6, pp. 1012–1016.
 13. Ostapenko V.V. O zakonakh sokhraneniya teorii melkoy vody [On the laws of conservation of shallow water theory]. *DAN*, 2015, Vol. 464, No. 5, pp. 558–561 (In Russian).
 14. Punzmann H., Shats M., Xia H. Phase Randomization of Three-Wave Interactions in Capillary Waves. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, Iss. 103, p. 26946.
 15. Tan M., Friend J., Matar O., Yeo L. Capillary wave motion excited by high frequency surface acoustic waves. *Phys. Fluids*, 2023, Iss. 22, p. 112112.
 16. Rahimzadeh A., Ahmadian Y.M.R., Eslamian M. Experimental study on the characteristics of capillary surface waves on a liquid film on an ultrasonically vibrated substrate. *Fluid Dynamics Research*, 2018, Iss. 50.
 17. Xu J., Attinger D. Acoustic excitation of superharmonic capillary waves on a meniscus in a planar micro-geometry. *Phys. Fluids*, 2009, Iss. 19.
 18. Shen L., Denner F., Morgan N., Wachem B., Dini D. Capillary waves with surface viscosity. *J. Fluid Mech.*, 2018, Iss. 847, pp. 644–663.
 19. Schmidmayer K., Petitpas F., Daniel E., Favrie N., Gavriluk S. A model and numerical method for compressible flows with capillary effects. *J. Comput. Phys.*, 2017, Iss. 334, pp. 468–496.

20. Taller D., Go D. Modulated exponential films generated by surface acoustic waves and their role in liquid wicking and aerosolization at a pinned drop. *Phys. Rev. E, Statistical, Nonlinear, and Soft Matter Phys.*, 2013, Iss. 87, p. 53004.
21. Simon J.C., Sapozhnikov O.A., Khokhlova V.A., Crum L.A., Bailey M.R. Ultrasonic atomization of liquids in drop-chain acoustic fountains. *J. Fluid Mech.*, 2015, Iss. 766, pp. 129–146.
22. Sugondo A., Sutrisno T., Anggono W., Anne O. Effect of Frequency on Droplet Characteristics in Ultrasonic Atomization Process. *E3S Web of Conf.*, 2019, Vol. 19, p. 1002.
23. Ehrhorn J., Semke W. Numerical prediction of vibration induced liquid atomization. *Inter. Inter. J. Nov. Res. Engrg. & Pharm.Sci.*, 2014, Vol. 1, Iss. 3, pp. 1–9.
24. Golykh R., Shalunov A., Khmelev V., Lopatin R., Minakov V., Shakura V. Evaluation of optimum modes and conditions providing increasing ultrasonic cavitation area in high-viscous and non-newtonian fluids. *Romanian J. Acoustics and Vibration.*, 2020, Vol. 17, No. 2, pp. 101–108.

УДК 622.24

ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ И ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СИГНАЛОВ КОНДУКТОМЕТРИЧЕСКОГО ДАТЧИКА ДЛЯ ОЦЕНИВАНИЯ МИНЕРАЛИЗАЦИИ ПОПУТНОЙ ЖИДКОСТИ В ГАЗОЖИДКОСТНОМ ПОТОКЕ

© 2025 Ю. А. Дашевский^{1,2a}, И. В. Суродина^{1b}, И. Н. Ельцов^{1,3c}

¹Институт вычислительной математики
и математической геофизики СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 6, г. Новосибирск 630090, Россия,

²Новосибирский государственный университет,
ул. Пирогова, 1, г. Новосибирск, 630090, Россия,

³Новосибирский государственный технический университет,
просп. Карла Маркса, 20, г. Новосибирск 630073, Россия

E-mails: ^adashyuly48@mail.ru, ^bsur@ommfao1.sccc.ru, ^cinyeltsov@sscc.ru

Поступила в редакцию 24.07.2024 г.; после доработки 17.10.2025 г.;
принята к публикации 06.11.2025 г.

Рассматриваются вопросы создания математической модели и программного обеспечения для развития технологии мониторинговых наблюдений за степенью обводнения газовых и газоконденсатных скважин. Для этой цели используют кондуктометрические датчики для измерения электрофизических параметров жидкости в скважинном продукте, установленные в нижней части горизонтального трубопровода. Основной целью исследования является разработка, отладка и верификация программно-алгоритмических средств для численного моделирования сигналов кондуктометрического датчика, применяемого для определения степени минерализации попутной жидкости в газожидкостном потоке. Исследование включает в себя анализ механизмов образования электрического поля в датчике, физических принципов формирования индуцированных зарядов, а также влияния контрастности удельных электрических сопротивлений материалов датчика на измеряемые сигналы. Основным методом исследования математическое моделирование, выполненное с использованием аналитических, асимптотических и численных решений с контролируемой точностью. Для отладки программных средств использовались результаты лабораторных экспериментов с растворами различной солёности. Теоретически и экспериментально доказано, что сопротивление, измеряемое датчиком любой конструкции, изготовленным из сильно контрастных по удельному электрическому сопротивлению материалов, прямо пропорционально удельному электрическому сопротивлению жидкости, находящейся внутри датчика. Апробирование на модельных и экспериментальных данных показало эффективность разработки. Статья вносит вклад в разработку инструментов для эффективного контроля обводнения газовых и газоконденсатных скважин, обеспечивая оперативный мониторинг непосредственно на газовом промысле без взятия проб и последующего ресурсозатратного гидрохимического анализа.

Ключевые слова: диагностика попутной воды, кондуктометрический датчик, минерализация попутной жидкости, газожидкостный поток, численное моделирование.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2025.28.305

ВВЕДЕНИЕ

Добычные характеристики газовых и газоконденсатных скважин снижаются при появлении во время добычи воды любого типа [1, 2, 3]. Своевременное обнаружение обводнения

продукции и диагностирование типа воды (пластовая, техногенная, конденсационная) позволяет правильно планировать геологотехнические мероприятия для эффективной добычи скважинного продукта. Эволюцию представлений о способах диагностирования типа воды можно проследить в серии работ [4, 5, 6, 7, 8, 9].

Под пластовой водой мы понимаем свободную воду пластов коллекторов, способную к перемещению. Она, как правило, имеет высокую степень минерализации и низкое электрическое сопротивление. Появление пластовой воды свидетельствует о поднимающемся конусе заводнения и/или латеральном продвижении фронта пластовой воды. Увеличение её количества приводит к сокращению срока службы скважины, что требует проведения специальных мероприятий. Техногенная вода — водная часть технической жидкости, введённой в пласт при бурении, эксплуатации и ремонте скважин. Диапазон электропроводности такой воды очень широк и зависит от типов технологических жидкостей. Этот фактор обводнения является полностью контролируемым. Конденсационная вода образуется в результате конденсации водяных паров, содержащихся в пластовом газе.

Как показывает опыт, геофизические полевые и скважинные исследования технически сложны, трудоёмки и дороги. Поэтому они не годятся для использования в качестве оперативных методов контроля. Гидрохимический контроль также не всегда применим и влечёт значительные трудовые и материальные затраты. Различные аспекты применения геофизических и геохимических методов исследований рассматриваются в следующих публикациях [10, 11, 12, 13, 14, 15].

В последние годы была разработана и проверена в производственных условиях новая технология контроля обводнённости газовых и газоконденсатных скважин. Она основана на непрерывном мониторинге удельного электрического сопротивления и температуры попутной жидкости, измеряемых в потоке газа, поступающего на газовый промысел непосредственно на наземном оборудовании [16].

Основной трудностью при измерении электрического сопротивления в газожидкостном потоке является очень низкая концентрация жидкости (менее 100 мл/м³), поскольку в штатном режиме работы из скважины поступает практически сухой газ [17, 18]. Был найден способ концентрирования жидкости в специальном углублении, где располагаются измерительные электроды [19].

Разработанная технология научно обоснована и экспериментально опробована, однако её внедрение сдерживается отсутствием математической модели и цифрового двойника кондуктометрического датчика.

Целью данного исследования является разработка математической модели устройства для измерения степени минерализации попутной жидкости в газожидкостном потоке для выявления природы попутной воды, а также создание программно-алгоритмических средств для численного моделирования.

Использованный в эксперименте датчик и вспомогательное оборудование для него имеют ряд технических особенностей. В состав комплекта для мониторинга входят блок питания, ноутбук с программным обеспечением для записи данных и датчики температуры и электрического сопротивления. Датчик сопротивлений подключается к газовой трубе с предельным давлением 16 (160) Мпа (кг/см²), который работает в диапазоне температур от -4 до +50°C и измеряет сопротивление от 10 до 10000 Ом · м с погрешностью ±0.5%. Допустимый диапазон измеряемых минерализаций 0,1–300 г/л, абсолютная погрешность измерения температуры ± 0.5°C.

Датчик сопротивления диаметром 26 мм включает в себя два электрода, отстоящих друг от друга на 9 мм, и ячейку, в которой накапливается измеряемая жидкость. Диаметр и длина электродов равны 0.5 мм и 5 мм, соответственно. Конструкция ячейки такова, что толщина слоя жидкости над электродами превышает 10 мм. Подробное описание конструкции приведено в [19].

Действие датчика основано на физическом принципе, который учитывает зависящую от удельного электрического сопротивления жидкости степень минерализации раствора и его температуру в момент измерения. Этот процесс однозначно связан с измеряемым межэлектродным электрическим сопротивлением, которое определяется как отношение разности потенциалов электродов к величине тока в цепи.

В работе решается актуальная научная задача, обусловленная необходимостью оперативного контроля за обводнением скважин путём создания цифрового двойника датчика, позволяющего оптимизировать его конструкцию и чувствительность к измеряемым параметрам.

1. ОБЪЕКТЫ И МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

При решении задачи исследовался механизм образования стационарного электрического поля в датчике, основанный на физическом принципе формирования объёмных и поверхностных индуцированных зарядов. Был выполнен анализ интегральных уравнений, описывающих поведение этих зарядов в проводящей среде и установлена степень влияния контрастности удельных сопротивлений конструкционных материалов датчика на измеряемые сигналы.

В качестве основного метода исследования было выбрано математическое моделирование, опирающееся на аналитические [20, 21], асимптотические [22], а также численные решения с контролируемой точностью двумерных и трёхмерных краевых задач стационарной геоэлектрики. В работе были задействованы интегрирование быстро осциллирующих функций с переносом пути интегрирования в комплексную плоскость [23], нелинейная минимизация и вычисление статистических характеристик [24, 25]. Для отладки программных средств использовались результаты лабораторных экспериментов с растворами различной солёности.

Многочисленные эксперименты, выполненные с датчиком в лаборатории, выявили отсутствие частотной зависимости сигнала в диапазоне частот менее 1000 Гц. Поэтому, вычислительная схема строилась на основе уравнения Лапласа.

Механизм образования стационарного электрического поля в датчике основан на законе Кулона, который, как известно [26], действует и в том случае, когда постоянный ток распространяется в трехмерно неоднородной проводящей среде. Исходя из закона Ома, объединяющего вектор плотности тока \mathbf{j} , электрическое поле \mathbf{E} и удельную электрическую проводимость γ , имеем $\mathbf{j} = \gamma \mathbf{E}$. Поскольку $\operatorname{div} \mathbf{j} = 0$, то можно записать следующую цепочку равенств:

$$\operatorname{div} \mathbf{j} = \operatorname{div} \gamma \mathbf{E} = \gamma \operatorname{div} \mathbf{E} + \mathbf{E} \cdot \operatorname{grad} \gamma = 0 \quad (1)$$

В точках неоднородной проводящей среды, где $\mathbf{E} \cdot \operatorname{grad} \gamma \neq 0$, появляется объёмный индуцированный заряд с плотностью δ :

$$\delta = \operatorname{div} \mathbf{E} = -\frac{\mathbf{E} \cdot \operatorname{grad} \gamma}{\gamma} \quad (2)$$

Если в проводящей среде присутствует разрыв значения электропроводности, то в каждой точке P такой границы раздела электрических свойств возникает поверхностный заряд $\sigma(P)$:

$$\sigma(P) = 2\kappa_{12} \cdot E_n^{\text{aver}}(P) \quad (3)$$

Здесь $\kappa_{12} = (\gamma_1 - \gamma_2)/(\gamma_1 + \gamma_2)$ — так называемый коэффициент контрастности, удовлетворяющий очевидному условию: $|\kappa_{12}| \leq 1$; γ_1, γ_2 — электропроводность по разные стороны границы; $E_n^{\text{aver}}(P)$ — среднее из значений нормальной к границе компоненты электрического поля, взятых по обе стороны границы. Предполагается, что нормаль к границе направлена из среды (1) в среду (2).

Объёмные и поверхностные заряды, возникающие в неоднородной проводящей среде, подчиняются закону Кулона и служат источником электрического поля и соответствующих токов

в проводящей среде. Физический механизм образования стационарного электрического поля в проводящей среде подробно рассмотрен в работах [21, 26, 27, 28]. Для описания поведения индуцированных в проводящей среде зарядов необходимо построить и решить соответствующие интегральные уравнения [29].

Пусть такие уравнения построены, их решения получены и распределение плотности поверхностного заряда известно на всех границах раздела. Тогда для того, чтобы получить значение потенциала в заданной точке среды, необходимо, используя закон Кулона, проинтегрировать вклад зарядов, расположенных на границах.

Таким образом, потенциал ϕ_{charges} всех индуцированных зарядов в некоторой точке R_0 среды может быть представлен в следующем виде:

$$\phi_{\text{charges}}(R_0) = \int_{S_1} \sigma_1(S_1) \hat{G}(S_1, R_0) dS + \dots + \int_{S_\kappa} \sigma_\kappa(S_\kappa) \hat{G}(S_\kappa, R_0) dS + \int_{S_N} \sigma_N(S_N) \hat{G}(S_N, R_0) dS. \quad (4)$$

Здесь N — общее количество границ раздела электрических свойств; κ — порядковый номер границы раздела электрических свойств ($\kappa = 1, \dots, N$); $\sigma_\kappa(S_\kappa)$ — распределение плотности заряда на границе с номером κ ; $\hat{G}(S_\kappa, R_0)$ — функция Грина задачи (потенциал в точке R_0 , создаваемый точечными источниками с единичным зарядом, расположенными на границе с номером κ).

Для полного решения краевой задачи моделирования распределения электрического поля в среде к потенциалу ϕ_{charges} индуцированных зарядов следует добавить потенциал первичного поля (электрода с током).

Применим соотношение (4) для анализа свойств электрических сигналов в модели. Как следует из представленных данных, в области пространства, занятой ячейкой, выделяются три типа границ раздела сред с разными электрическими свойствами: «жидкость — металл», «жидкость — изолятор», «изолятор — металл». В качестве изолятора выступает воздух или материал, непроводящий электрический ток.

Проведённый анализ позволяет сформулировать следующие особенности формирования электрического поля в датчике.

— На всех границах раздела электрических свойств соответствующие коэффициенты контрастности равны единице по абсолютной величине. В функцию Грина $\hat{G}(S_\kappa, R_0)$ электрические свойства среды не входят.

— Среднее электрическое поле $E_n^{\text{aver}}(P)$ прямо пропорционально первичному полю электрода с током I , а следовательно, и удельному сопротивлению ρ_0 , поскольку в однородной среде потенциал ϕ_0 на расстоянии R от электрода выражается следующим образом:

$$\phi_0 = \rho_0 I / 4\pi R. \quad (5)$$

Сформулированные выше свойства приводят к следующим выводам.

— Сопротивление \mathbf{R} между электродами A и B двухэлектродного датчика, изготовленного из сильно контрастных по удельному электрическому сопротивлению материалов, прямо пропорционально удельному электрическому сопротивлению ρ жидкости, находящейся внутри датчика: $\mathbf{R} = K \cdot \rho$, где K — постоянный коэффициент, отражающий конструктивные особенности датчика сопротивлений.

— При практическом определении величины \mathbf{R} , измеренный сигнал линейно зависит от удельного сопротивления ρ жидкости: $\mathbf{R} = K \cdot \rho + B$. Поскольку с уменьшением величины ρ значение \mathbf{R} монотонно убывает, величина константы B позволяет судить о погрешностях эксперимента. При математическом моделировании речь идёт о погрешностях вычислений.

— Выводы 1, 2 допускают обобщение на любые конструкции ячеек, изготовленные из сильно контрастных по электрическим свойствам материалов, и на любые виды многоэлектродных измерений при помощи этих конструкций.

Для модели датчика, принятой при разработке средств математического моделирования, сформулирована краевая задача для электрического потенциала и разработаны программно-алгоритмические средства моделирования значений электрического сопротивления \mathbf{R} , измеряемого между электродами A и B .

Входными параметрами программного продукта, помимо конструктивных параметров ячейки, служат удельное электрическое сопротивление и высота столба жидкости, находящаяся в ячейке. Выходным расчётным параметром программы моделирования выступает соответствующая введённым данным величина \mathbf{R} .

В современной научной литературе имеется такое понятие как вычислительный электромагнетизм [30]. Арсенал применяемых методов расчёта электрических и магнитных полей значителен [31, 32, 33]. В нашей работе краевая задача для электрического потенциала от двух электродов сводится к моделированию потенциалов двух точечных источников постоянного тока в среде с заданным распределением электропроводности $\gamma(x, y, z) = 1/\rho(x, y, z)$.

В декартовой системе координат уравнение для потенциала примет вид

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\gamma \frac{\partial \Phi^a}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\gamma \frac{\partial \Phi^a}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\gamma \frac{\partial \Phi^a}{\partial z} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left((\gamma_0 - \gamma) \frac{\partial \Phi^0}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left((\gamma_0 - \gamma) \frac{\partial \Phi^0}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left((\gamma_0 - \gamma) \frac{\partial \Phi^0}{\partial z} \right), \quad (6)$$

где $\Phi = \Phi^0 + \Phi^a$, Φ^0 определён формулой (5), Φ^a — аномальный потенциал, Φ — полный потенциал электрического поля, I — сила тока, $R = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ — расстояние от источника, γ_0 — удельная электрическая проводимость металла (электрода).

Как следует из формулы (5), при удалении от источника потенциал затухает как $1/R$, поэтому вдали от источников ($x = \pm X, y = \pm Y, z = \pm Z$) для функции Φ^a справедливы предельные значения:

$$\Phi^a|_{x=\pm X} = 0, \quad \Phi^a|_{y=\pm Y} = 0, \quad \Phi^a|_{z=\pm Z} = 0. \quad (7)$$

Уравнения (6) и (7) определяют задачу Дирихле для одного точечного источника.

Для дискретизации данной задачи используем консервативную разностную схему [18]. Полученную систему линейных алгебраических уравнений приводим к симметричному виду с помощью диагонального преобразования подобия

$$\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}. \quad (8)$$

Матрица \mathbf{A} в уравнении (8) является симметричной, сильно разреженной, действительной, положительно определённой. Для быстрого решения системы (8) была использована видеокарта K40. Специально для графических процессоров ранее был разработан алгоритм метода сопряжённых градиентов со встроенным параллельным предобуславливателем, основанным на аппроксимации обратной матрицы. Алгоритм достигает полного параллелизма за счёт того, что используются только матрично-векторные операции и вектор-векторные операции (скалярное произведение, сложение векторов), которые есть в стандартной библиотеке CUBLAS. Кроме того, в реализации метода не требуется отдельно вычислять и хранить саму предобуславливающую матрицу — важен лишь результат воздействия этой матрицы на вектор. Масштабирование матрицы (приведение исходной матрицы к матрице с единичными диагональными элементами) также значительно снижает количество операций на каждом шаге итерационного процесса и требуемой памяти для хранения самой матрицы. Все совокупные факторы позволили получить очень эффективный и быстрый алгоритм решения поставленной краевой задачи. Подробно этот подход изложен и обоснован в работах [34, 35]. После решения двух краевых задач вычисляется разность потенциалов между электродами A и B и рассчитывается кажущееся сопротивление.

Потенциалы на электродах при переносе точечного источника поля из одного электрода в другой должны совпадать в силу симметрии датчика относительно продольной оси. На этом свойстве потенциала основан встроенный в программу блок контроля, постоянно задействованный при её работе.

Тестирование и отладка программы моделирования сигналов датчика проходили в три этапа.

Этап 1. Проверка принципа взаимности. Одним из возможных методов тестирования программ моделирования электромагнитных полей служит проверка выполнения так называемого принципа взаимности. В нашей задаче принцип взаимности проявляется в неизменности значения потенциала при смене положений источника и приёмника поля. Обсуждаемые здесь аспекты касаются источника и приёмника в контексте математической модели и не имеет отношения к самому датчику.

Серия вычислительных экспериментов показала, что значения потенциала остаются неизменными с вычислительной погрешностью в 1–2 %. Такая точность является достаточной для численного решения поставленной задачи моделирования. Расчёты проведены на видеокарте K40 кластера НКС30Т+GPU ССКЦ СО РАН.

Этап 2. Сравнение с аналитическим решением. В качестве тестовой рассматривалась допускающая аналитическое решение задача о поле источника тока на поверхности проводящего слоя, лежащего на изоляторе. На этом этапе корректировалась расчётная неравномерная сетка: подбирались размеры расчётной области, выполнялось уплотнение вблизи электродов. Установлено, что применённые сеточные алгоритмы позволяют вычислять потенциал, совпадающий с тестовыми значениями с абсолютной погрешностью 1–2 %.

Этап 3. Сравнение с результатами лабораторного эксперимента. На рис. 1 приведены результаты сравнения модельных сигналов R_{mod} и сигналов R_{exp} , полученных экспериментально для нескольких значений солёности жидкости, находящейся в датчике.

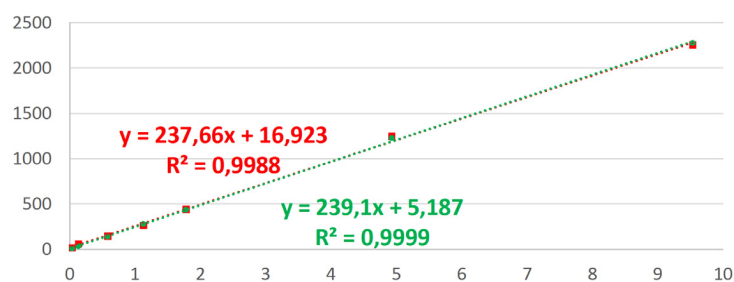


Рис. 1. Зависимость модельных R_{mod} (зелёный цвет) и экспериментальных R_{exp} (красный цвет) сигналов от удельного сопротивления жидкости в ячейке

Полученные данные обрабатывались в стандартном пакете Excel. Как следует из данных (см. рис. 1), качество линейной аппроксимации модельных сигналов функцией $y = ax + b$ ($R^2 = 0,9999$) лишь незначительно отличается от соответствующего параметра для сигналов экспериментальных ($R^2 = 0,9988$).

2. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В результате проведённого исследования создана математическая модель поточного измерителя сопротивлений газожидкостной смеси и разработан цифровой двойник сложного в электрофизическом смысле устройства.

Основываясь на физическом механизме формирования стационарного электрического поля в кондуктометрическом датчике и анализе соответствующих интегральных уравнений, описывающих поведение электрического поля в устройстве, доказано теоретически, что электрическое сопротивление, измеряемое датчиком любой конструкции, изготовленным из сильно контрастных по удельному электрическому сопротивлению материалов, прямо пропорционально удельному электрическому сопротивлению жидкости, находящейся внутри датчика.

Полученный результат был подтверждён с помощью верифицированных программно-алгоритмических средств двумерного и трёхмерного моделирования значений электрического сопротивления, измеряемого двухэлектродным датчиком, а его достоверность закреплена дополнительно с помощью лабораторных экспериментов.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исходя из изучения механизма формирования стационарного электрического поля в датчике, анализа физических принципов формирования объёмных и поверхностных индуцированных зарядов, а также учёта влияния контрастности удельных сопротивлений конструкционных материалов датчика на измеряемые сигналы, был разработан и верифицирован комплекс программно-алгоритмических средств для численного моделирования сигналов кондуктометрического датчика. Устройство применяется в промышленности для измерения степени минерализации попутной жидкости в газожидкостном потоке и определения типа попутной воды.

Успешное тестирование разработанного программного продукта на модельных и экспериментальных данных позволяет сделать вывод о создании адекватной математической модели и эффективного инструментария для численного моделирования сигналов, регистрируемых датчиком с целью определения минерализации жидкости, выносимой с потоком газа, которые имеют практическую значимость.

Созданный инструментарий создаст устойчивые предпосылки для калибровки, тестирования и создания метрологического обеспечения. Цифровой двойник позволит исследовать чувствительность устройства к измеряемым параметрам, проводить сценарные расчёты для применения технологии на новых газовых промыслах, характеризующихся существенно различными параметрами газожидкостной смеси и режимами работ скважин. С использованием цифрового двойника упрощается процесс оптимизации конструктивных элементов устройства и их интеграция в соответствующие технологические цепочки.

Ряд вопросов, касающихся работы датчика, к настоящему времени не решён. Отсутствуют научно обоснованные и технически реализованные оценки степени влияния механических примесей на показания кондуктометрического датчика. Эти примеси, представляющие собой частицы шлама и твёрдой фазы технологических растворов, практически всегда выносимые с жидкостью, не проводят электрический ток. Перспективным направлением дальнейших исследований представляется научное обоснование количественной оценки влияния механических примесей на сигнал датчика и разработка метода исключения влияния механических примесей на показания датчика.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена рамках гос. задания «Математические модели, численные методы, суперкомпьютерное математическое моделирование и информационно-вычислительные технологии в задачах математической и прикладной геофизики при исследовании и мониторинге природной среды, процессов и опасных явлений» (проект FWNМ-2025-0004). 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. Гасумов Р.А., Минликаев В.З. Техника и технология ремонта скважин. Т. 1. М.: ООО «Газпром экспо», 2013.
2. Ли Дж., Никенс Г., Уэллс М. Эксплуатация обводняющихся газовых скважин. Технологические решения по удалению жидкости из скважин. М.: ООО «Премиум Инжиниринг», 2008.
3. Научноисследовательский институт природных газов и газовых технологий (ООО «ВНИИГАЗ»). СТО Газпром 6-2005. Методическое руководство по определению компонентного состава природных и сточных вод на объектах газовой промышленности. **Город: Издательство**, 2005.
4. Abdou M.K. et al. Finding Value in Formation Water // Oilfield Review Spring. 2011. V. 23, N 1. P. 24–35.
5. Francisca F., Yun T.-S., Ruppel C., Santamarina J. C. Geophysical and geotechnical properties of near-seafloor sediments in the northern Gulf of Mexico gas hydrate province // Earth Planet Sci. Lett. 2005. V. 237, Iss. 3–4. P. 924–939; DOI: 10.1016/j.epsl.2005.06.050
6. Раупов И. Р., Касымов М. Подбор геолого-технических мероприятий для борьбы с обводнением газовых скважин // Бурение и нефть. 2023. Т. 1. С. 103.
7. Тупышев М.К. Влияние техногенных процессов на содержание воды в продукции газовых скважин // Актуальные проблемы нефти и газа. 2020. Т. 1, Вып. 28. С. 1–5.
8. Subhashini S., Karthi S. Study of Identifying Liquid Loading in Gas Wells and Deliquification Techniques // Internat. J. Engrg. Research & Technology (IJERT). 2019. V. 8, Iss. 6. P. 1434–1445.
9. Харитонов А.Н. Проблемы эксплуатации газовых скважин зрелых месторождений Западной Сибири и пути их решения // Нефтяная провинция. 2021. Т. 4, Вып. 28. С. 155–185; DOI:10.25689/NP.2021.4.155-185
10. Пермяков В.С. и др. Оптимизация схемы гидрохимического контроля за обводнением газовых и газоконденсатных скважин // Интерэкспо Гео-Сибирь. 2019. Т. 3. С. 201–208.
11. Манзырев Д.В., Пермяков В.С. Способ диагностики попутных вод газоконденсатных скважин по данным их анализа электрохимическими методами, **2711024, 14 января 2020 г.**
12. Stogryn A. Equations for Calculating the Dielectric Constant of Saline Water (Correspondence) // IEEE Trans Microw Theory Tech. V. 19, Iss. 8. P. 733–736; DOI:10.1109/TMTT.1971.1127617
13. Judakova Z., Janousek L., Carnecka L., Svantnerova I. Conductometry as an evaluation tool in research into the impact of low-frequency electromagnetic field irradiation on cells // 23rd International Conference on Computational Problems of Electrical Engineering (CPEE), Zuberec, Slovakia. 2022. P. 1–4.
14. Федота К.В., Вавилова Г.В., Леонов А.Е. Отличие градуировочных зависимостей при реализации кондуктометрического метода, в Интеграция науки, образования и производства - основа реализации Плана нации // Сагиновские чтения № 14. Труды Межд. научно-практ. online конф. Ч. 1., Караганда: Карагандинский гос. техн. университет (КарГТУ). 2022. С. 478–480.
15. Xiaoping S., Spitzer P., Sudmeier U. Novel method for bulk resistance evaluation in conductivity measurement for high-purity water // Accreditation and Quality Assurance. 2007. V. 12, Iss. 7. P. 351–355; DOI:10.1007/s00769-007-0258-5
16. Пермяков В.С., Манштейн А.К., Ельцов И.Н., Юркевич Н.В. Контроль за обводнением газовых скважин по удельной электрической проводимости жидкой фазы водогазового потока // Геология, геофизика и разработка нефтяных и газовых месторождений. 2020. Т. 5, Вып. 341. С. 52–57.
17. Кагиров А.Г., Романенко С.В., Дошинский Я.Н. Отклик тока двухэлектродного кондуктометрического датчика на импульсное воздействие напряжения // Контроль. Диагностика. 2012. Вып. 13. С. 8–11.
18. Wu Y.C. et al. A dc method for the absolute determination of conductivities of the primary standard KCl solutions from 0-degrees-C to 50-degrees-C // J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol. 1994. V. 99, Iss. 3. P. 241–246; DOI:10.6028/jres.099.019
19. Manstein A.K., Sokolov P.A. Method for measuring the mineralization of aqueous solutions in pipeline flows // Russian Journal of Geophysical Technologies. 2023. V. 1. P. 4–12; DOI:10.18303/2619-1563-2023-1-4

20. Константинов О.В., Бугров В.Е., Колесникова А.Л. Лекции по классической электродинамике. Учеб. пособие. СПб.: Университет ИТМО, 2021.
21. Kaufman A.A., Dashevsky Y.A. Principles of Induction Logging. Elsevier Science, 2003.
22. Грибанов А.Н., Курушин А.А., Кузнецов И.А. Асимптотические методы электродинамики. Солон-пресс, 2020.
23. Никитенко М.Н., Глинских В.Н., Михайлов И.В., Федосеев А.А. Математическое моделирование сигналов импульсного электромагнитного зондирования для мониторинга состояния многолетне-мерзлых пород // Геология и геофизика. 2022. С. 1–9; DOI:10.15372/GiG2022132
24. Агекян Т. А. Основы теории ошибок для астрономов и физиков. М.: Наука, 1972.
25. Нильсен Э. Практический анализ временных рядов: прогнозирование со статистикой и машинное обучение. СПб.: ООО «Диалектика», 2021.
26. Альпин Л.М. Теория поля. М.: Недра, 1966.
27. Kaufman A.A., Itskovich G.B. Basic Principles of Induction Logging. Elsevier, 2017.
28. Kaufman A.A., Donadille J.M. Principles of Dielectric Logging Theory. Elsevier, 2021.
29. Дашевский Ю.А. Математическое моделирование и численный анализ новых возможностей стационарной геоэлектрики, Автореф. дис. ... д.ф.-м.н., Новосибирск, 2001.
30. Bossavit A. Computational electromagnetism: variational formulation, complementarity, edge Elements. San Diego, CA: Academic Press Inc., 1998.
31. Shurina E.P. et al. Determination of thermal, stiffness and electrical effective tensors in composite media // J. Comput. Appl. Math. 2022. V. 409. P. 114009; DOI:10.1016/j.cam.2021.114009
32. Shurina E.P., Itkina N.B., Markov S.I. A discontinuous Galerkin method for mathematical simulating of gas-liquid mixture flows // J. Phys. Conf. Ser. 2020. V. 1615, Iss. 1. P. 012009; DOI:10.1088/1742-6596/1615/1/012009
33. Добролюбова Д.В., Шурина Э.П. Application of a modified variational formulation of the vector finite element method for modelling a harmonic electric field in areas with curved shields // Вычисл. технологии. 2021. Вып. 3. С. 26–41; DOI:10.25743/ICT.2021.26.3.003
34. Суродина И.В. Параллельные алгоритмы для решения прямых задач электрического каротажа на графиче-ских процессорах // Математические заметки СВФУ. 2015. Т. 22, Вып. 2. С. 51–61.
35. Labutin I.B., Surodina I.V. Algorithm for Sparse Approximate Inverse Preconditioners in Conjugate Gradient Method // Reliable Comput. (Interval Computations) J. 2013. V. 19.

UDC 622.24

**THEORETICAL ANALYSIS AND NUMERICAL SIMULATION
OF CONDUCTOMETRIC SENSOR SIGNALS FOR ESTIMATION
OF ASSOCIATED FLUID MINERALIZATION IN A GAS WELL**© 2025 Yu. A. Dashevsky^{1,2a}, I. V. Surodina^{1b}, I. N. Eltsov^{1,3c}¹*Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS,
prosp. Akad. Lavrentieva, 6, Novosibirsk 630090, Russia,*²*Novosibirsk State University,
ul. Pirogova, 1, Novosibirsk 630090, Russia,*³*Novosibirsk State Technical University,
prosp. Karla Marksa, 20, Novosibirsk 630073, Russia*E-mails: ^adashyuly48@mail.ru, ^bsur@ommfao1.sccc.ru, ^cinyeltsov@sscc.ru

Received 24.07.2024, revised 17.10.2025, accepted 06.11.2025

Abstract. The article is devoted to the creation of a mathematical model and software for the development of technology for monitoring observations of the degree of watering of wells producing gas and gas condensate. For this purpose, conductometric sensors are used to measure electrophysical parameters of fluid in the well product, installed in the lower part of the horizontal pipeline. The main purpose of the study is the development, debugging and verification of software and algorithmic tools for numerical simulation of signals of conductometric sensor used to determine the degree of mineralization of associated fluid in the gas-liquid flow. The study includes analysis of the mechanisms of electric field formation in the sensor, physical principles of induced charge formation, as well as the influence of contrast of specific electrical resistances of the sensor materials on the measured signals. The main method of research is mathematical modeling performed using analytical, asymptotic and numerical solutions with controlled accuracy. The work involved integration of rapidly oscillating functions with transfer of the integration path to the complex plane, nonlinear minimization, calculation of statistical characteristics, parallel fast algorithms for solving the system of linear algebraic equations on graphic processors. The results of laboratory experiments with solutions of different salinity were used to debug the software tools. As a result, a mathematical model of an in-line gas-liquid mixture electrical resistance meter was created, and verified software-algorithmic means of two-dimensional and three-dimensional modeling of electrical resistance values measured by a two-electrode sensor were developed. It has been theoretically and experimentally proved that the resistance measured by a sensor of any design made of materials of strongly contrasting specific electrical resistance is directly proportional to the specific electrical resistance of the liquid inside the sensor. Validation on model and experimental data has shown the effectiveness of the development. The article contributes to the development of tools for effective control of watering of gas and gas condensate wells, providing operational monitoring directly at the gas field without sampling and subsequent resource-consuming hydrochemical analysis.

Keywords: associated water diagnostics, conductometric sensor, associated fluid mineralization, gas-liquid flow, numerical simulation.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2025.28.305

REFERENCES

1. Gasumov R.A., Minlikaev V.Z. *Tekhnika i tekhnologiya remonta skvazhin* [Well repair equipment and technology]. Moscow: OOO «Gazprom ekspoz» Publ., Vol. 1, 2013.
2. Li Dzh., Nikens G., Uells M. *Ekspluatatsiya obvodnyayushchikhsya gazovykh skvazhin. Tekhnologicheskie resheniya po udaleniyu zhidkosti iz skvazhin* [Operation of watered gas wells. Technological solutions for liquid removal from wells]. Moscow: Premium Inzhiniring Publ. [Premium Engineering Publ.], 2008 (in Russian).
3. Nauchnoissledovatel'skii institut prirodnkh gazov i gazovykh tekhnologii (OOO «VNIIGAZ»). *STO Gazprom 6-2005. Metodicheskoe rukovodstvo po opredeleniyu komponentnogo sostava prirodnkh i stochnykh vod na ob"ektakh gazovoi promyshlennosti* [Methodological guidelines for determining the component composition of natural and wastewater at gas industry facilities]. Moscow: OAO «Gazprom» Publ., 2005 (in Russian).
4. Abdou M.K. et al. Finding Value in Formation Water. *Oilfield Review Spring*, 2011, Vol. 23, No. 1, pp. 24–35.
5. Francisca F., Yun T.-S., Ruppel C., Santamarina J.C. Geophysical and geotechnical properties of near-seafloor sediments in the northern Gulf of Mexico gas hydrate province. *Earth Planet. Sci. Lett.*, 2005, Vol. 237, Iss. 3–4, pp. 924–939; DOI: 10.1016/j.epsl.2005.06.050
6. Raupov I.R., Kasymov M. Podbor geologo-tekhnicheskikh meropriyatii dlya bor'by s obvodneniem gazovykh skvazhin [Selection of geological and technical measures to combat water encroachment of gas wells]. *Burenie i neft'* [Drilling and oil], 2023, Vol. 1, pp. 103 (in Russian).
7. Tupysev M.K. Vliyanie tekhnogennykh protsessov na sodержanie vody v produktsii gazovykh skvazhin [The influence of technogenic processes on the water content in gas well products]. *Aktual'nye problemy nefti i gaza* [Current problems of oil and natural gas], 2020, Vol. 1, Iss. 28, pp. 1–5 (in Russian).
8. Subhashini S., Karthi S. Study of Identifying Liquid Loading in Gas Wells and Deliquification Techniques. *Internat. J. Engrg. Research & Technology (IJERT)*, 2019, Vol. 8, Iss. 6, pp. 1434–1445.
9. Kharitonov A.N. Problemy ekspluatatsii gazovykh skvazhin zrelykh mestorozhdenii Zapadnoi Sibiri i puti ikh resheniya [Problems of operating gas wells in mature fields of Western Siberia under conditions of active water and sand production and ways to solve them]. *Neftyanaya provintsia* [Oil Province], 2021, Vol. 4, Iss. 28, pp. 155–185; DOI:10.25689/NP.2021.4.155-185 (in Russian).
10. Permyakov V.S. et al. Optimizatsiya skhemy gidrokhimicheskogo kontrolya za obvodneniem gazovykh i gazokondensatnykh skvazhin [Optimization of the scheme of hydrochemical control over the refrigeration of gas and gas-condensate wells]. *Interekspo Geo-Sibir'* [Interexpo Geo-Siberia], 2019, Vol. 3, pp. 201–208 (in Russian).
11. Manzyrev D.V., El'tsov I.N., Men'shikov S.N., Arkhipov Yu.A., Kharitonov A.N., Edelev A.V., Permyakov V.S. Sposob diagnostiki poputnykh vod gazokondensatnykh skvazhin po dannym ikh analiza elektrokhimicheskimi metodami [A method for diagnosing associated waters from gas condensate wells based on their analysis using electrochemical methods]. The patent RU 2711024, 14.01.2020 (in Russian).
12. Stogryn A. Equations for Calculating the Dielectric Constant of Saline Water (Correspondence). *IEEE Trans Microw Theory Tech.*, Vol. 19, Iss. 8, pp. 733–736; DOI:10.1109/TMTT.1971.1127617
13. Judakova Z., Janousek L., Carnecka L., Svantnerova I. Conductometry as an evaluation tool in research into the impact of low-frequency electromagnetic field irradiation on cells. 23rd International Conf. on Comput. Problems of Electrical Engrg. (CPEE), Zuberec, Slovakia, 2022, pp. 1–4.
14. Fedota K.V., Vavilova G.V., Leonov A.E. Otliche graduirovocnykh zavisimostej pri realizacii konduktometricheskogo metoda [Difference of graduation dependences at implementation of conductometric method]. *Saginovskie chteniya, No. 14, Trudy Mezhdunarodnoj Nauchno-Prakticheskoy Onlain Konferencii*, [Saginovsky readings, No. 14, Proceedings of the international scientific and practical online conference], June 16-17, 2022, Karaganda], Karaganda, 2022, Part 1, pp. 478–480 (in Russian).
15. Xiaoping S., Spitzer P., Sudmeier U. Novel method for bulk resistance evaluation in conductivity measurement for high-purity water. *Accreditation and Quality Assurance*, 2007, Vol. 12, Iss. 7, pp. 351–355; DOI:10.1007/s00769-007-0258-5

16. Permyakov V.S., Manshtein A.K., El'tsov I.N., Yurkevich N.V. Kontrol' za obvodneniem gazovykh skvazhin po udel'noi elektricheskoi provodimosti zhidkoi fazy vodogazovogo potoka [Control over watering of gas wells by the unit electrical conductivity of the liquid phase water-gas flow]. *Geologiya, geofizika i razrabotka neftnykh i gazovykh mestorozhdenii* [Geology, geophysics and development of oil and gas fields], 2020, Vol. 5, Iss. 341, pp. 52–57 (in Russian).
17. Kagiroy A.G., Romanenko S.V., Doshchinskii Ya.N. Otklik toka dvukhelektrodnogo konduktometricheskogo datchika na impul'snoe vozdeistvie napryazheniya [Electric current response at two-electrode conductometric sensor to voltage pulse effect]. *Kontrol'. Diagnostika* [Control. Diagnostics], 2012, Iss. 13, pp. 8–11 (in Russian).
18. Wu Y.C. et al. A dc method for the absolute determination of conductivities of the primary standard KCl solutions from 0-degrees-C to 50-degrees-C. *J. Res. Natl. Inst. Stand. Technol.*, 1994, Vol. 99, Iss. 3, pp. 241–246 (in Russian); DOI:10.6028/jres.099.019
19. Manstein A.K., Sokolov P.A. Method for measuring the mineralization of aqueous solutions in pipeline flows. *Russian J. Geophysical Technologies*, 2023, Vol. 1, pp. 4–12; DOI:10.18303/2619-1563-2023-1-4
20. Konstantinov O.V., Bugrov V.E., Kolesnikova A.L. Lektsii po klassicheskoi elektrodinamike [Lectures on classical electrodynamics]. Ucheb. posobie. Saint Petersburg: Universitet ITMO Publ., 2021 (in Russian).
21. Kaufman A.A., Dashevsky Y.A. Principles of Induction Logging. Elsevier Sci., 2003.
22. Gribov A.N., Kurushin A.A., Kuznetsov I.A. Asimptoticheskie metody elektrodinamiki [Asymptotic methods in electrodynamics]. Solon-press Publ., 2020 (in Russian).
23. Nikitenko M.N., Glinskikh V.N., Mikhailov I.V., Fedoseev A.A. Mathematical modeling of transient electromagnetic sounding signals for monitoring the state of permafrost. *Russian Geology and Geophysics*, 2023, Vol. 64, No. 4, pp. 488–494; doi:10.2113/RGG20224514
24. Agekyan T.A. Osnovy teorii oshibok dlya astronomov i fizikov [Fundamentals of Error Theory for Astronomers and Physicists]. Moscow: Nauka, 1972 (in Russian).
25. Nil'sen E. Prakticheskii analiz vremennykh ryadov: prognozirovaniye so statistiko i mashinnoye obucheniye [Practical Time Series Analysis: forecasting with statistics and machine learning]. Saint Petersburg: OOO «Dialektika» Publ., 2021 (in Russian).
26. Al'pin L.M. Teoriya polya [Field theory]. Moscow: Nedra, 1966 (in Russian).
27. Kaufman A.A., Itskovich G.B. Basic Principles of Induction Logging. Elsevier, 2017.
28. Kaufman A.A., Donadille J.M. Principles of Dielectric Logging Theory. Elsevier, 2021.
29. Dashevskii Yu. A. Parallelnye algoritmy dlya resheniya pryamykh zadach elektricheskogo karotazha na grafiche-skikh protsessorakh [Mathematical modeling and numerical analysis of new possibilities of stationary geoelectrics]. Abstr. of dis. ... d. ph.-m. s., Novosibirsk, 2001 (in Russian).
30. Bossavit A. Computational Electromagnetism: Variational Formulation, Complementarity, Edge Elements. San Diego, CA: Academic Press Inc., 1998.
31. Shurina E.P. et al. Determination of thermal, stiffness and electrical effective tensors in composite media. *J. Comput. Appl. Math.*, 2022, Vol. 409, pp. 114009; DOI:10.1016/j.cam.2021.114009
32. Shurina E.P., Itkina N.B., Markov S.I. A discontinuous Galerkin method for mathematical simulating of gas-liquid mixture flows. *J. Phys. Conf. Ser.*, 2020, Vol. 1615, Iss. 1, pp. 012009; DOI:10.1088/1742-6596/1615/1/012009
33. Dobrolyubova D.V., Shurina E.P. Application of a modified variational formulation of the vector finite element method for modelling a harmonic electric field in areas with curved shields. *Vychislitel'nye tekhnologii* [Comp. technol.], 2021, Iss. 3, pp. 26–41 (in Russian); DOI:10.25743/ICT.2021.26.3.003.
34. Surodina I.V. Parallelnye algoritmy dlya resheniya pryamykh zadach elektricheskogo karotazha na grafiche-skikh protsessorakh [Parallel GPU solvers for the solution of direct electriclogging problems. *Matematicheskie zametki SVFU* [NEFU Mathematical Notes], 2015. Vol. 22, Iss. 2, pp. 51–61 (in Russian).
35. Labutin I.B., Surodina I.V. Algorithm for Sparse Approximate Inverse Preconditioners in Conjugate Gradient Method. *Reliable Comput. (Interval Computations) J.*, 2013, Vol. 19.

УДК 519.622.2

БИБЛИОТЕКА ПРОГРАММ CCODE ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЖЁСТКИХ СИСТЕМ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

© 2025 К. П. Сактоева^a, Ю. М. Лаевский^b

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

E-mails: ^asaktueva33@gmail.com, ^blaev@labchem.sccc.ru

Поступила в редакцию 24.05.2025 г.; после доработки 17.06.2025 г.;
принята к публикации 17.09.2025 г.

Рассмотрена библиотека программ для решения жёстких систем обыкновенных дифференциальных уравнений, основанная на (m, k) -методах переменного шага интегрирования и протестированная на некоторых системах, описывающих процессы химической кинетики. Основное внимание уделено выбору наиболее эффективных схем и сравнению их производительности с широко используемой программой RADAU5.

Ключевые слова: библиотека программ, жёсткие системы, одношаговые методы, химическая кинетика, численный эксперимент.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2025.28.306

Введение

В статье дано краткое описание разработанной в Институте вычислительной математики и математической геофизики СО РАН библиотеки программ CCODE для решения жёстких систем обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Речь идёт о задаче Коши для автономной системы уравнений:

$$\begin{aligned}\frac{dy}{dt} &= f(y), \quad t > 0, \\ y(0) &= y_0,\end{aligned}$$

где y , f и y_0 — векторы-столбцы размерности d . Вектор $y(t)$ — искомое решение, y_0 — заданный вектор. Тот факт, что рассматривается автономная система, не ограничивает общности, поскольку всегда можно расширить систему, вводя дополнительную компоненту решения $y_{d+1} = t$. Краткость описания означает, что данная работа не может заменить программную документацию с детальным рассмотрением всех функций библиотеки, включая входную/выходную информацию. Основное внимание в работе уделено выбору методов интегрирования и соответствующих программных кодов из заданного класса для решения некоторых практических задач. Понятие жёсткости системы ОДУ и связанные с ним проблемы построения методов интегрирования хорошо известны (см., например, монографию [1]) и здесь не обсуждается. Важным поставщиком жёстких систем являются процессы химической кинетики, и именно решению такого сорта задач уделено основное внимание при разработке библиотеки CCODE. Отметим, что одной из основных мотиваций данной работы явилась потребность в такой библиотеке для решения задач химической кинетики в пакете программ «ЛОГОС» [2].

Методической основой библиотеки CCODE является класс одношаговых безытерационных (m, k) -методов, предложенных Е.А. Новиковым в 1988 году [3]. Эти методы являются

обобщением схемы Розенброка, существенно повышающим их производительность [4]. В пункте 1 статьи будут рассмотрены некоторые конкретные $(m, 2)$ -методы, детально изученные в статье [5], и составляющие алгоритмическую базу библиотеки. А именно, будут приведены L -устойчивые $(4, 2)$ -методы 3-го порядка точности [6] и $(5, 2)$ -методы 3-го и 4-го порядков точности [7] с различными наборами параметров, задающими конкретные методы. При этом важным элементом алгоритмов, фактически определяющим их эффективность, является стратегия изменения величины шага интегрирования, обеспечивающая заданную точность вычислений. Наиболее эффективной, на наш взгляд, стратегией является вычисление глобальной погрешности на основе вложенных методов (см., например, [1]). Для (m, k) -методов, соответствующие результаты приведены в [8]. В отличие от общепринятого подхода, когда для оценки погрешности дополнительно к основному методу строится метод более высокого порядка, Е.А. Новиковым было предложено использовать метод более низкого порядка, использующий вычисленные стадии основного метода. При этом удалось сконструировать алгоритмы, в которых наряду с основной схемой промежуточные схемы также являются L -устойчивыми. Именно такие методы приведены в статьях [6], [7]. Изложение пункта 1 данной статьи в целом соответствует работе [9].

Структура библиотеки CCODE кратко описана в пункте 2. Здесь перечислены функциональные модули библиотеки без детального описания соответствующих интерфейсов. Отметим, что в начале 2000-х годов Е.А. Новиков передал одному из соавторов настоящей статьи комплекс ФОРТРАН-программ, реализующий некоторую стратегию перехода с явного метода на неявный и обратно в зависимости от текущей жёсткости системы ОДУ. При этом в качестве неявного метода в комплексе использовался $(5, 2)$ -метод 3-го порядка точности. Такого сорта универсальный подход зачастую приводит к большим накладным расходам, связанными с анализом жёсткости задачи, на основании которого программа принимает решение о переключении на другой метод. Предназначение библиотеки CCODE состоит не в решении систем с заранее неизвестной жёсткостью, а в её использовании для решения задач химической кинетики, являющихся, как правило, чрезвычайно жёсткими. Именно поэтому библиотека включает набор C++ программ, реализующих методы из пункта 1, и в настоящей версии библиотеки конкретный выбор программы предоставлен пользователю. Собственно, одной из целей данной статьи является обеспечение пользователя определёнными рекомендациями относительно выбора метода. Библиотека содержит $(4, 2)$ -метод 3-го порядка точности с двумя наборами параметров и $(5, 2)$ -метод 4-го порядка с четырьмя наборами. Выбору лучших наборов параметров посвящён пункт 3, в котором проводится экспериментальное сравнение производительности методов на реакции Робертсона, являющейся популярным модельным примером из области химической кинетики [10].

Далее, в пункте 4 проводится тестирование CCODE на трёх задачах из области химической кинетики. Это лазерный пиролиз этана [11], процессы горения водорода [12] и малых углеводородов [13]. Соответствующие задачи Коши приведены в Приложении. Для этих задач осуществлено сравнение производительности библиотеки CCODE с программой RADAU5, разработанной Э. Хайрером и Г. Ванером на основе метода Радо IIА [1] и опубликованной в виде текста ФОРТРАН-программы в этой же монографии. Мы выбрали для сравнения RADAU5, поскольку, на наш взгляд, на задачах химической кинетики эта программа является одной из самых эффективных и работает не хуже таких известных пакетов, как LSODE [14], VODE [15] и др., разработанных в Ливерморской лаборатории (LLNL) на основе метода Гира [16]. При тестировании использовалась программа из [17].

И, наконец, в пункте 5 приводятся некоторые комментарии, связанные с дополнительными возможностями библиотеки CCODE и её дальнейшим развитием.

Авторы посвящают данную работу памяти профессора Е.А. Новикова, чьи фундаментальные и прикладные результаты легли в основу разрабатываемой библиотеки программ.

1. Методы интегрирования и оценка погрешности

В этом пункте приводятся L -устойчивые $(4, 2)$ - и $(5, 2)$ -методы с L -устойчивыми внутренними схемами, реализованные в библиотеке CCODE. В дальнейшем используется обозначение

$$D_n = E - ahJ_n, \quad (1)$$

где $J_n = \partial f / \partial y(y_n)$ – матрица Якоби системы ОДУ в точке y_n , E – единичная матрица, a – числовой параметр, h – текущий шаг интегрирования. $(4, 2)$ -метод с внутренней схемой записывается в виде:

$$y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3 + p_4 k_4, \quad (2)$$

$$D_n k_1 = hf(y_n),$$

$$D_n k_2 = k_1,$$

$$D_n k_3 = hf(\tilde{y}_{n+1}) + \alpha_{32} k_2,$$

$$D_n k_4 = k_3 + \alpha_{42} k_2,$$

где внутренняя схема задаётся равенством

$$\tilde{y}_{n+1} = y_n + \beta_{31} k_1 + \beta_{32} k_2. \quad (3)$$

L -устойчивость метода с L -устойчивой внутренней схемой обеспечивают два набора параметров, приведённых в табл. 1 и используемых в библиотеке CCODE.

Таблица 1

Коэффициенты $(4, 2)$ -метода

Набор 1	Набор 2	
a	1.2803300858899	0.2196699141101
p_1	1.2803300858899	0.2196699141101
p_2	-0.8138796466463	0.4126450787451
p_3	1.0694742839250	0.5107726296546
p_4	-0.4768816913329	0.0818199629379
β_{31}	1.2803300858899	0.2196699141101
β_{32}	-0.5303300858899	0.5303300858899
α_{32}	-0.9483253348642	-9.6766746651350
α_{42}	-1.0546169964430	67.335866996443

Рассмотрим вопрос о реализованной в библиотеке стратегии выбора шага интегрирования $(4, 2)$ -метода 3-го порядка, основанной на оценке глобальной погрешности, которая, в свою очередь, вычисляется с использованием технологии вложенных методов. Наряду с (2) используется равенство

$$z_{n+1} = y_n + r_2 k_2 + r_3 k_3, \quad (4)$$

где k_2 и k_3 – стадии схемы (2), а r_2 и r_3 вычисляются по формулам

$$r_2 = 1 - (1 + \alpha_{32})r_3, \quad r_3 = \frac{1/2 - 2a}{3/4 - a + a\alpha_{32}}.$$

Для таких коэффициентов (4) является схемой 2-го порядка точности. Введём вектор

$$e_n = \sum_{i=1}^m \gamma_i k_i, \quad (5)$$

где $\gamma_i = p_i - r_i$, m – количество стадий. В рассматриваемом случае $m = 4$, $r_1 = r_4 = 0$. При этом, согласно (2), (4), $e_n = y_{n+1} - z_{n+1}$. Выбор шага h основан на контроле за выполнением неравенства

$$\varepsilon_n(j_n) = \max_{k=1,\dots,d} \frac{|(D_n^{1-j_n} e_n)_k|}{|y_{n,k}| + \rho} \leq \varepsilon, \quad j_n = 1, 2, \quad (6)$$

где индекс k означает номер компоненты вектора, ρ – положительное число, отвечающее за переход от контроля относительной ошибки ε к контролю абсолютной ошибки $e = \rho\varepsilon$ в случае выполнения неравенства $|y_n^i| < \rho$. Наличие матрицы $D_n^{1-j_n}$ связано с отсутствием L -устойчивости вспомогательной схемы (4), и при $j_n = 1$ главный член глобальной ошибки не стремится к нулю при $h \rightarrow \infty$. Это негативно сказывается на производительности метода при резком увеличении шага. Ситуацию исправляет возможность использования значения $j_n = 2$. Далее, положим

$$\tilde{q}(j_n) = \left(\frac{\varepsilon}{\varepsilon_n(j_n)} \right)^{1/p}, \quad (7)$$

где p – порядок метода. В рассматриваемом случае $p = 3$. Кроме того, во избежание резкого увеличения или уменьшения шага интегрирования, что может приводить к неоправданным колебаниям шага, будем полагать: $q(j_n) = \tilde{q}(j_n)$ при $0.8 < \tilde{q}(j_n) < 1.2$, $q(j_n) = 0.8$ в случае $\tilde{q}(j_n) \leq 0.8$, и $q(j_n) = 1.2$ в случае $\tilde{q}(j_n) \geq 1.2$.

Пусть известны текущий шаг h_n и вектор приближённого решения y_n . Процесс вычислений на n -м шаге состоит в выполнении следующего набора действий.

Шаг 1. Вычисляются правая часть $f(y_n)$ и матрица Якоби J_n .

Шаг 2. В соответствии с (1) формируется матрица D_n при $h = h_n$ и осуществляется её LU -декомпозиция.

Шаг 3. В соответствии с (2), (3) последовательно вычисляются векторы $k_1, k_2, \tilde{y}_{n+1}, f(\tilde{y}_{n+1}), k_3, k_4$.

Шаг 4. В соответствии с формулами (5)–(7) вычисляются вектор e_n и величины $\varepsilon_n(1), q(1)$.

Шаг 5. Если $q(1) \geq 1$, переходим на шаг 7. В противном случае ($q(1) < 1$) в соответствии с (6), (7) вычисляем $\varepsilon_n(2), q(2)$.

Шаг 6. Если $q(2) \geq 1$, переходим на шаг 8. В противном случае ($q(2) < 1$) полагаем $h_{new} = q(2)h_n$, и, полагая $h_n = h_{new}$, возвращаемся на шаг 2.

Шаг 7. По формуле (2) вычисляем вектор y_{n+1} , и, полагая $h_{n+1} = q(1)h_n$, переходим на $n + 1$ -й шаг метода.

Шаг 8. По формуле (2) вычисляем вектор y_{n+1} , и, полагая $h_{n+1} = q(2)h_n$, переходим на $n + 1$ -й шаг метода.

Перейдём к рассмотрению (5, 2)-метода с одной внутренней схемой. Имеем:

$$y_{n+1} = y_n + p_1 k_1 + p_2 k_2 + p_3 k_3 + p_4 k_4 + p_5 k_5, \quad (8)$$

$$D_n k_1 = h f(y_n),$$

$$D_n k_2 = k_1,$$

$$D_n k_3 = h f(\tilde{y}_{n+1}) + \alpha_{32} k_2,$$

$$D_n k_4 = k_3 + \alpha_{42} k_2,$$

$$D_n k_5 = k_4,$$

где внутренняя схема имеет вид (3).

Т а б л и ц а 2

Коэффициенты (5, 2)-метода 4-го порядка

Набор 0	Набор 1	Набор 2	Набор 3	Набор 4
a	1.2803300858899	1.2803300858899	0.2196699141101	0.2196699141101
p_1	1.2803300858899	1.2803300858899	0.2196699141101	0.2196699141101
p_2	-2.9633753074324	-0.4126555970145	0.2668352254833	0.4223322710492
p_3	3.1291760925648	1.3255448884221	0.4018412761404	0.5117942753850
p_4	-4.5962853086115	-0.9890229003261	0.2996826699665	0.0797766714772
p_5	2.0597018086393	0.2560706044966	-0.1089313535143	0.0010216457303
β_{31}	1.2803300858899	1.2803300858899	0.2196699141101	0.2196699141101
β_{32}	-0.5303300858899	-0.5303300858899	0.5303300858899	0.5303300858899
α_{32}	0.0435955592067	-2.5668493086922	-2.3385478649438	-10.481948385463
α_{42}	-0.8139366291378	-1.4473367655718	6.8503244659407	73.973448927883

Процесс выбора шага интегрирования аналогичен приведённому выше для (4, 2)-метода. Вместо (4) рассмотрим следующую вспомогательную схему 3-го порядка точности:

$$z_{n+1} = y_n + r_1 k_1 + r_2 k_2 + r_3 k_3 + r_4 k_4, \quad (9)$$

где k_1, \dots, k_4 – стадии схемы (8), а r_1, \dots, r_4 вычисляются по следующим формулам:

$$\begin{aligned} r_1 &= \frac{11}{27} - r_2 - \alpha_{42} r_4 - \frac{16}{27} \alpha_{32}, \\ r_2 &= \frac{1}{18a} - 1 - \frac{32}{27} \alpha_{32} - (1 + \alpha_{32} + 2\alpha_{42}) r_4, \\ r_3 &= \frac{16}{27} - r_4, \\ r_4 &= \left(\frac{43}{27} a^2 - \frac{13}{9} a + \frac{1}{6} - \frac{16}{27} a^2 \alpha_{32} \right) / \left(2a^2 \alpha_{32} + a^2 \alpha_{42} + \frac{3}{4} a \right). \end{aligned}$$

Процесс вычислений совпадает с описанным выше с той лишь разницей, что вместо (2) используется равенство (8) с дополнительной пятой стадией, в (5) и в (7) полагается $m = 5$ и $p = 4$ соответственно, и коэффициенты γ_i вычисляются с учётом формул для коэффициентов r_i , входящих в (9).

2. Описание библиотеки CCODE

Библиотека CCODE предоставляет пользователю для решения системы ОДУ два основных комплекса программ *ccodea* и *ccoden*, отличающиеся друг от друга вычислением матрицы Якоби J_n с использованием её явного вида и численного представления на основе задаваемой правой части уравнений соответственно. В данном пункте дано описание только комплекса программ *ccodea*, для которого в пп. 3 и 4 приводятся численные результаты. Интерфейс библиотеки CCODE представлен на языке программирования C++ как набор следующих программ:

ccodea.cpp — предоставляет пользователю программу, реализующую один из методов решения задачи Коши с аналитическим вычислением матрицы Якоби, инициализирует выбранный пользователем набор коэффициентов;

coef.cpp — программа, задающая коэффициенты для определённого $(m, 2)$ -метода в зависимости от значения входного параметра *ipar*[40]: при

$$ipar[40] = 1/ipar[40] = 2/ipar[40] = 3/ipar[40] = 4$$

используется набор 1/набор 2/набор 3/набор 4 коэффициентов (5,2)-метода четвёртого порядка, при $ipar[40]=5/ipar[40]=6$, используется набор 1/набор 2 коэффициентов (4,2)-метода третьего порядка;

`ccode42.cpp` — реализует пошаговый алгоритм (см. п.1) для (4,2)-метода с обращением к программам пользователя, задающим вычисление правой части и матрицы Якоби системы ОДУ, входящих в список формальных параметров: *rhs* и *jacmat* соответственно;

`ccode52.cpp` — аналогично `ccode42.cpp` реализует пошаговый алгоритм для (5,2)-метода 4-го порядка точности;

`des.cpp` — осуществляет *LU*-декомпозицию заданной формулой (1) матрицы D_n с выбором главного элемента по столбцу, контролируется интервал устойчивости, если появляются собственные числа матрицы Якоби с положительной вещественной частью;

`sol.cpp` — используя представление $D_n = L_n U_n$, находит стадии k_i решением двух систем с треугольными матрицами: $L_n u_i = g_i$ и $U_n k_i = u_i$.

В качестве формальных параметров процедура *ccodea* содержит всю необходимую для решения системы ОДУ входную информацию: размерность системы d , решение y (при первом обращении к *ccodea* содержит начальные данные y_0), конец интервала интегрирования t_{end} , *rhs* и *jacmat* — функции, задающие вектор правой части и матрицу Якоби системы соответственно, минимальный шаг интегрирования h_{min} , относительная ошибка ε , величина ρ , регулирующая переход от контроля относительной ошибки к контролю абсолютной ошибки, выбор конкретного метода по значению $ipar[40]$. В качестве фактических параметров, определяющих функции для вычисления вектора правой части и матрицы Якоби, пользователь может задавать любые имена. Но структура этих процедур жёстко определена. Для процедуры, задающей правую часть системы, имеем:

```
void < ... > (int * d, double * y, double * f)
{
    ...
    f[i] = fi+1(y);    // i = 0, ..., d - 1
    ...
}
```

Матрица Якоби задаётся следующей процедурой:

```
void < ... > (int * d, double * y, double * a)
{
    ...
    a[i + d * j] = dfi+1/dyj+1(y);    // i, j = 0, ..., d - 1
    ...
}
```

Отметим, что массив $a[k]$ упорядочен по столбцам матрицы Якоби.

На рис. 1 схематично изображена часть библиотеки CCODE, использующая задаваемую пользователем матрицу Якоби системы ОДУ. В комплексе программ *ccoden* соответствующая процедура отсутствует, и матрица Якоби вычисляется по заданной пользователем правой части системы.

3. Численный выбор методов

Данный пункт посвящён экспериментальному выбору наилучших с точки зрения производительности наборов параметров для (4, 2)- и (5, 2)-методов. При этом выборе мы не используем традиционный подход, предполагающий тестирование методов на достаточно большом

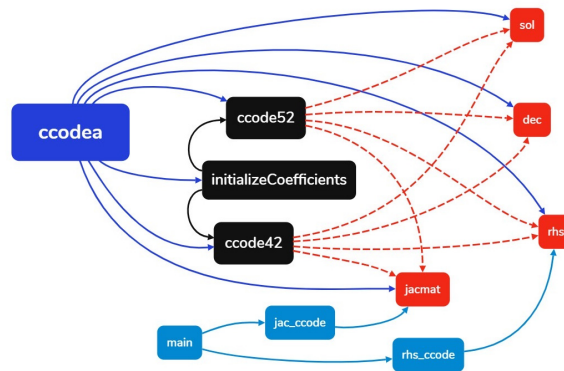


Рис. 1. Схема функционирования библиотеки CCODE

наборе задач, а проводим расчёты на хорошо известной модельной задаче Робертсона из области химической кинетики, предложенной в статье [10] (см. также [1], стр. 11 в русскоязычном издании). На интервале $(0, t_{\text{end}}]$, $t_{\text{end}} = 10^{11}$ с рассматривается система

$$\begin{aligned} \frac{dy_1}{dt} &= -0.04y_1 + 10^4 y_2 y_3, \\ \frac{dy_2}{dt} &= 0.04y_1 - 10^4 y_2 y_3 - 3 \cdot 10^7 y_2^2, \\ \frac{dy_3}{dt} &= 3 \cdot 10^7 y_2^2 \end{aligned} \quad (10)$$

с начальными данными

$$y_1(0) = 1, \quad y_2(0) = y_3(0) = 0.$$

В [17] приведено точное (до 16 значащих цифр) решение задачи на момент времени t_{end} :

$$\begin{aligned} y_1(t_{\text{end}}) &= 0.2083340149701284 \cdot 10^{-7}, \\ y_2(t_{\text{end}}) &= 0.8333360770334744 \cdot 10^{-13}, \\ y_3(t_{\text{end}}) &= 0.9999999791665152. \end{aligned} \quad (11)$$

Обычно в качестве оценки производительности метода используют количества вычислений правой части и матрицы Якоби, а также количество обратных ходов метода Гаусса. Этот, в целом объективный подход для оценки производительности, требует наличия информации о затратах времени на указанные вычисления, которые самым существенным образом зависят от решаемой задачи – её размерности, заполненности матрицы Якоби и пр. В связи с этим производительность при выборе предпочтительного набора коэффициентов оценивается непосредственными замерах времени расчёта, как среднее время из 10 запусков задачи Робертсона. Отметим, что по окончании решения задачи в массиве *ipar* содержится информация об указанных выше величинах. Время измеряется C++ функцией *steady_clock*, использование которой может быть представлено в виде:

```

...
autotime_begin = std::chrono::steady_clock::now();
...
autotime_end = std::chrono::steady_clock::now();
...

```

Все, представленные в этом и следующем пункте результаты расчётов, получены на компьютере с процессором 12th Gen Intel® Core™ i5-12450H 2.00 GHz под управлением ОС Windows 11.

В Таблице 3 приведены времена решения задачи Робертсона (4,2)-методом при двух вариантах коэффициентов, представленных в Таблице 1. При этом использовались значения $\rho = 1$ (ρ – параметр, определяющий абсолютную погрешность через задаваемую пользователем относительную погрешность ε) и $h_0 = 10^{-3}$ с (задаваемый пользователем начальный шаг интегрирования). Для наглядности на рисунке 2 приведены соответствующие диаграммы.

Таблица 3

Время решения (4,2)-методом, $\rho = 1$, $h_0 = 10^{-3}$ с

ε	10^{-7}	10^{-6}	10^{-5}	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}
Набор 1	$3.05 \cdot 10^{-3}$	$1.66 \cdot 10^{-3}$	$7.10 \cdot 10^{-4}$	$3.79 \cdot 10^{-4}$	$2.79 \cdot 10^{-4}$	$2.94 \cdot 10^{-4}$
Набор 2	$1.10 \cdot 10^{-3}$	$5.96 \cdot 10^{-4}$	$3.94 \cdot 10^{-4}$	$2.77 \cdot 10^{-4}$	$2.63 \cdot 10^{-4}$	$2.68 \cdot 10^{-4}$

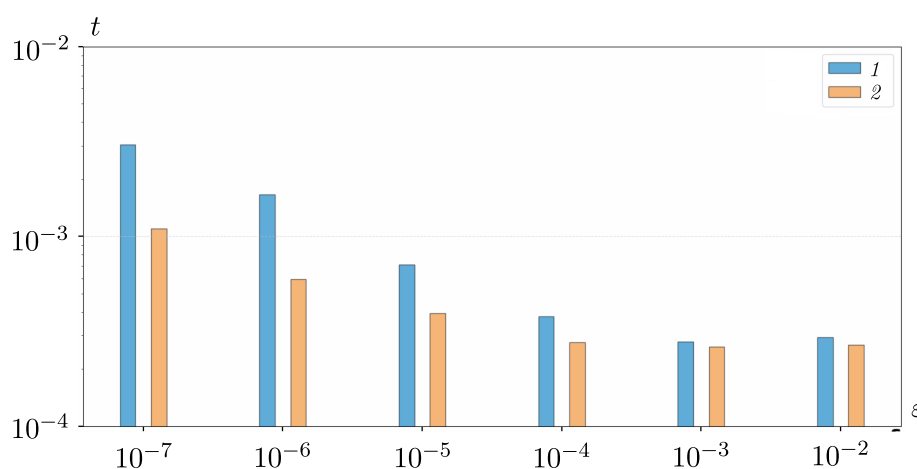


Рис. 2. Время решения (4,2)-методом, $\rho = 1$, $h_0 = 10^{-3}$ с;
1 – набор 1; 2 – набор 2

Таким образом, с точки зрения производительности выигрывает метод со вторым набором коэффициентов.

Приведём результаты о погрешности (4,2)-метода. В Таблице 4 указаны чебышёвские нормы векторов разности приближённого решения в момент времени t_{end} и соответствующего точного решения (11). В дальнейшем эти значения мы сравним с погрешностями (5,2)-метода. Отметим, что метод со вторым набором коэффициентов даёт существенно более точные результаты, по сравнению с первым набором.

Таблица 4

Погрешность для (4,2)-метода, $\rho = 1$, $h_0 = 10^{-3}$ с

ε	10^{-7}	10^{-6}	10^{-5}	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}
Набор 1	$6.6 \cdot 10^{-10}$	$6.5 \cdot 10^{-10}$	$6.2 \cdot 10^{-10}$	$6.7 \cdot 10^{-10}$	$6.4 \cdot 10^{-10}$	$6.0 \cdot 10^{-10}$
Набор 2	$1.5 \cdot 10^{-12}$	$1.5 \cdot 10^{-12}$	$1.4 \cdot 10^{-12}$	$1.4 \cdot 10^{-12}$	$1.4 \cdot 10^{-12}$	$1.5 \cdot 10^{-12}$

Решение вопроса о выборе параметра ρ зависит от конкретной задачи и предоставлено пользователю. В данном описании работы библиотеки CCODE при выборе этого параметра мы ориентируемся на порядок метода. Так для (4,2)-метода 3-го порядка точности вычисления проводятся при $\rho = 1$, а для (5,2)-метода 4-го порядка будет использовано значение $\rho = 10^{-3}$. Отметим, что для метода 5-го порядка RADAU5 в [1] обсуждается решение задачи Робертсона при $\rho = 10^{-6}$. При этом расчёты показывают, что при $\rho = 1$ RADAU5 не справляется с

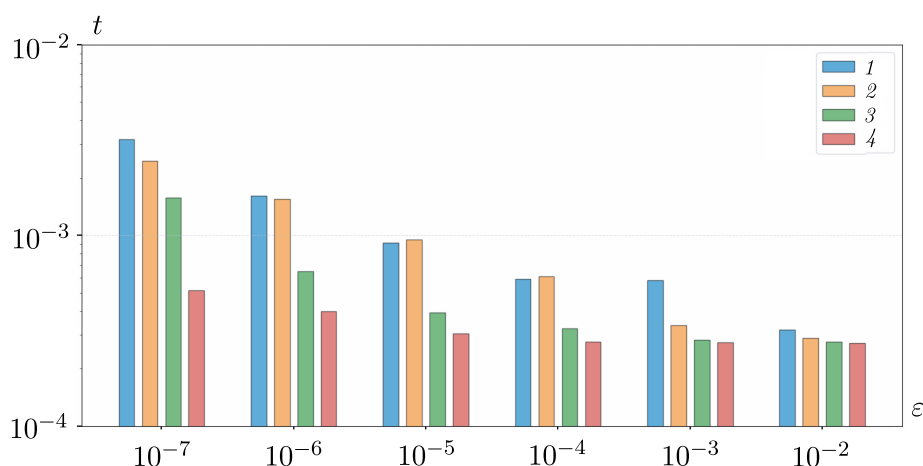


Рис. 3. Время решения (5,2)-методом, $\rho = 10^{-3}$, $h_0 = 10^{-3}$ с;
1 — набор 1; 2 — набор 2; 3 — набор 3

Как видно из табл. 4 и 7, абсолютные ошибки решений (4,2)- и (5,2)-метода практически совпадают — сказывается специфика задачи Робертсона. При этом (5,2)-метод экономичнее (4,2)-метода при $\varepsilon \leq 10^{-4}$, и, начиная с $\varepsilon = 10^{-4}$, производительность методов совпадает и увеличивается при $\varepsilon \geq 10^{-3}$.

Проведём сравнение (4,2)-метода со вторым набором коэффициентов и (5,2)-метода с четвёртым набором коэффициентов с точки зрения времени решения задачи. Кроме того, для сравнения приведём результаты, полученные методом RADAU5 при $\rho = 10^{-6}$. Напомним, что нами использовалась программа RADAU5 из [17]. При этом, чтобы поставить все методы в равные условия по контролю погрешности, для (4,2)- и (5,2)-методов, как и в RADAU5, полагаем $\rho = 10^{-6}$. Результаты сравнения времени решения представлены в Таблице 8 и на рисунке 4.

Таблица 8

Время решения (4,2)-, (5,2)-методами и RADAU5 при $\rho = 10^{-6}$

ε	10^{-7}	10^{-6}	10^{-5}	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}
(4,2)-метод	$1.61 \cdot 10^{-2}$	$5.64 \cdot 10^{-3}$	$2.09 \cdot 10^{-3}$	$8.50 \cdot 10^{-4}$	$3.91 \cdot 10^{-4}$	$3.16 \cdot 10^{-4}$
(5,2)-метод	$2.01 \cdot 10^{-3}$	$4.74 \cdot 10^{-4}$	$3.84 \cdot 10^{-4}$	$4.43 \cdot 10^{-4}$	$3.47 \cdot 10^{-4}$	$3.22 \cdot 10^{-4}$
RADAU5	$8.22 \cdot 10^{-3}$	$6.72 \cdot 10^{-3}$	$5.25 \cdot 10^{-3}$	$4.37 \cdot 10^{-3}$	$3.84 \cdot 10^{-3}$	$3.79 \cdot 10^{-3}$

В табл. 9 приведены погрешности для всех трёх методов.

Таблица 9

Погрешность для (4,2)-, (5,2)-методов и RADAU5 при $\rho = 10^{-6}$

ε	10^{-7}	10^{-6}	10^{-5}	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}
(4,2)-метод	$2.4 \cdot 10^{-15}$	$7.0 \cdot 10^{-15}$	$7.6 \cdot 10^{-14}$	$7.1 \cdot 10^{-13}$	$1.4 \cdot 10^{-12}$	$1.5 \cdot 10^{-12}$
(5,2)-метод	$2.8 \cdot 10^{-13}$	$9.7 \cdot 10^{-13}$	$1.3 \cdot 10^{-12}$	$1.4 \cdot 10^{-12}$	$1.4 \cdot 10^{-12}$	$1.4 \cdot 10^{-10}$
RADAU5	$2.8 \cdot 10^{-13}$	$2.6 \cdot 10^{-12}$	$2.4 \cdot 10^{-11}$	$2.4 \cdot 10^{-10}$	$2.2 \cdot 10^{-9}$	$1.1 \cdot 10^{-8}$

При высокой задаваемой относительной погрешности (5,2)-метод и RADAU5 показывают примерно одинаковую точность. Несколько завышенную точность даёт (4,2)-метод. Таким образом, в диапазоне задаваемой относительной погрешности от $\varepsilon = 10^{-7}$ до $\varepsilon = 10^{-2}$ при

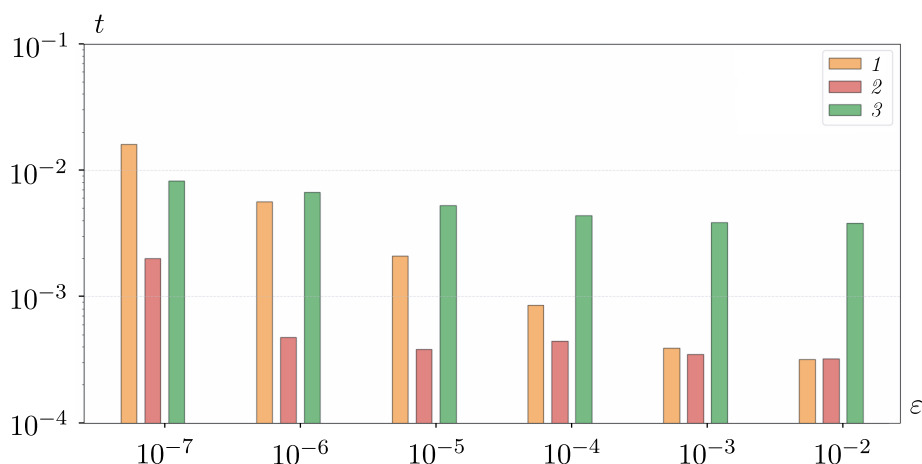


Рис. 4. Время решения (4,2)-, (5,2)-методами и RADAU5 при $\rho = 10^{-6}$; 1 — набор 1; 2 — набор 2; 3 — набор 3

$\rho = 10^{-6}$ наилучшее время решения демонстрирует (5,2)-метод с четвёртым набором коэффициентов. Отметим, что при небольшой относительной погрешности $\epsilon = 10^{-2}$ и $\rho = 1$ (4,2)-метод немного выигрывает по времени у (5,2)-метода. При этом, как указывалось выше, RADAU5 не работает.

4. Сравнение производительности с RADAU5

В данном пункте для трёх задач из области химической кинетики будут приведены результаты сравнения (4,2)-метода со вторым набором коэффициентов, (5,2)-метода с четвёртым набором коэффициентов и RADAU5. Параметры ρ и h_0 будут подбираться для каждой задачи экспериментально. При этом следует учитывать, что для задач химической кинетики кроме реализуемой точности необходимо гарантировать неотрицательность получаемых приближённых решений. Именно подбор параметров ρ и h_0 в каждой из задач обеспечит выполнение этого свойства. Ниже мы дадим краткое описание рассматриваемых задач, а соответствующие задачи Коши выписаны в Приложении. Для всех задач использовалась представленная в [18] программная технология формирования правой части и матрицы Якоби системы. В этом разделе и в Приложении используются традиционные обозначения k_i для скоростей элементарных химических реакций (в отличие от векторов стадий из разд. 1).

Задача 1. Первая задача описывает процесс пиролиза этана с образованием этилена в проточном реакторе с нагревом газовых компонент излучением CO₂-лазера [11]. Речь идёт об эндотермической реакции разложения C₂H₆ при атмосферном давлении и температуре 1000 K с основными продуктами реакции C₂H₄ (этилен), CH₄ (метан), H₂ и малыми включениями CH₃ (метил), C₂H₂ (ацетилен), C₃H₆ (пропилен) — всего 7 реагирующих компонент. В систему уравнений для удобства введена 8-я компонента, которая может быть исключена в силу имеющего место закона сохранения

$$8y_1 + 4y_2 + 7y_3 + 5y_4 + 2y_5 + 3y_6 + 6y_7 + 6y_8 \equiv \text{const}$$

(см. Приложение).

Результаты сравнения времени решения задачи 1 представлены в табл. 10 и на рис. 5. Для данной задачи во всех трёх методах полагалось $\rho = 10^{-6}$ и $h_0 = 10^{-6}$ с, т. е. значения параметров, рекомендуемые в [17] для RADAU5.

Рассмотрим вопрос о погрешности решений. В отличие от задачи Робертсона точное решение для вычисления погрешности отсутствует. В связи с этим приведём заданные формулой

Таблица 10

Время решения Задачи 1 (4,2)-, (5,2)-методами и RADAU5

ε	10^{-7}	10^{-6}	10^{-5}	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}
(4,2)-метод	$2.97 \cdot 10^{-3}$	$1.66 \cdot 10^{-3}$	$1.10 \cdot 10^{-3}$	$8.99 \cdot 10^{-4}$	$8.58 \cdot 10^{-4}$	$8.57 \cdot 10^{-4}$
(5,2)-метод	$1.06 \cdot 10^{-3}$	$9.33 \cdot 10^{-4}$	$9.31 \cdot 10^{-4}$	$9.30 \cdot 10^{-4}$	$9.27 \cdot 10^{-4}$	$9.68 \cdot 10^{-4}$
RADAU5	$1.94 \cdot 10^{-3}$	$1.48 \cdot 10^{-3}$	$1.22 \cdot 10^{-3}$	$1.15 \cdot 10^{-3}$	$1.22 \cdot 10^{-3}$	$2.40 \cdot 10^{-3}$

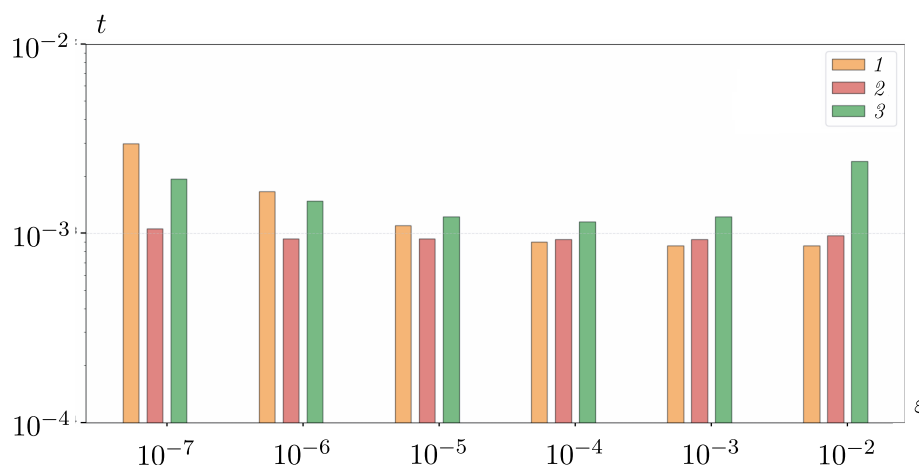


Рис. 5. Время решения Задачи 1 (4,2)-, (5,2)-методами и RADAU5;
1 — набор 1; 2 — набор 2; 3 — набор 3

(6) значения относительной погрешности $\varepsilon_{\text{end}} = \varepsilon_{n_{\text{end}}}(j_{n_{\text{end}}})$, где n_{end} — номер слоя, соответствующий конечному моменту времени.

Согласно табл. 11, методы «работают» в заданном диапазоне точности. При этом табл. 10 и рис. 5 иллюстрируют ожидаемую производительность: на низкой точности при $\varepsilon \geq 10^{-4}$ наиболее экономичным является (4,2)-метод, но проигрывает двум другим методам при высокой точности $\varepsilon \leq 10^{-5}$. При $\varepsilon \leq 10^{-5}$ лучшую производительность показывает (5,2)-метод. При этом для любой задаваемой относительной ошибки (5,2)-метод работает быстрее RADAU5.

Задача 2. Рассматривается модель процесса горения водорода H_2/O_2 , описанного в работе [12]. В реакциях данной модели участвует 11 реагентов: H , O , OH , H_2 , O_2 , H_2O , HO_2 , H_2O_2 , N_2 , Ar , He . Полученная с использованием [18] система уравнений, соответствующая кинетической схеме из статьи [12], приведена в Приложении. Там же указаны константы скоростей элементарных реакций и начальные данные.

Результаты сравнения времени решения задачи 2 представлены в табл. 12 и на рис. 6. Как и для задачи 1, здесь полагалось $\rho = 10^{-6}$, $h_0 = 10^{-6}$.

Аналогично табл. 11, в табл. 13 приведены значения вычисляемой ошибки ε_{end} в конечный момент времени. При этом использовались указанные выше значения параметров ρ и h_0 . Из табл. 13 видно, что вычисленная относительная ошибка не превосходит заданной. Сравнение времени решения показывает преимущество (4,2)-метода при точности, соответствующей значению $\varepsilon = 10^{-2}$. При $\varepsilon \leq 10^{-3}$ наиболее экономичным является (5,2)-метод. Отметим, что являясь методом 5-го порядка точности RADAU5 показывает лучшую по сравнению с (4,2)-методом производительность только при $\varepsilon \leq 10^{-5}$.

Задача 3. Рассматривается процесс горения малых углеводородов в соответствии с подробным механизмом реакции $\text{C}/\text{H}/\text{N}/\text{O}$, предложенным А.А. Конновым и размещённым в Интернете в 2000 году [13]. С тех пор этот механизм использовался во многих исследованиях

Таблица 11

Погрешность ε_{end} решения Задачи 1 (4,2)-, (5,2)-методами

ε	10^{-7}	10^{-6}	10^{-5}	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}
(4,2)-метод	$1.09 \cdot 10^{-8}$	$4.33 \cdot 10^{-8}$	$4.11 \cdot 10^{-7}$	$1.04 \cdot 10^{-6}$	$3.09 \cdot 10^{-6}$	$3.09 \cdot 10^{-6}$
(5,2)-метод	$8.94 \cdot 10^{-8}$	$7.86 \cdot 10^{-7}$	$9.94 \cdot 10^{-7}$	$9.94 \cdot 10^{-7}$	$9.94 \cdot 10^{-7}$	$9.94 \cdot 10^{-7}$

Таблица 12

Время решения Задачи 2 (4,2)-, (5,2)-методами и RADAU5

ε	10^{-7}	10^{-6}	10^{-5}	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}
(4,2)-метод	$1.68 \cdot 10^{-2}$	$8.42 \cdot 10^{-3}$	$4.60 \cdot 10^{-3}$	$2.85 \cdot 10^{-3}$	$1.61 \cdot 10^{-3}$	$1.38 \cdot 10^{-3}$
(5,2)-метод	$3.79 \cdot 10^{-3}$	$2.41 \cdot 10^{-3}$	$1.62 \cdot 10^{-3}$	$1.52 \cdot 10^{-3}$	$1.50 \cdot 10^{-3}$	$1.59 \cdot 10^{-3}$
RADAU5	$5.11 \cdot 10^{-3}$	$5.20 \cdot 10^{-3}$	$4.06 \cdot 10^{-3}$	$3.97 \cdot 10^{-3}$	$4.72 \cdot 10^{-3}$	$4.58 \cdot 10^{-3}$

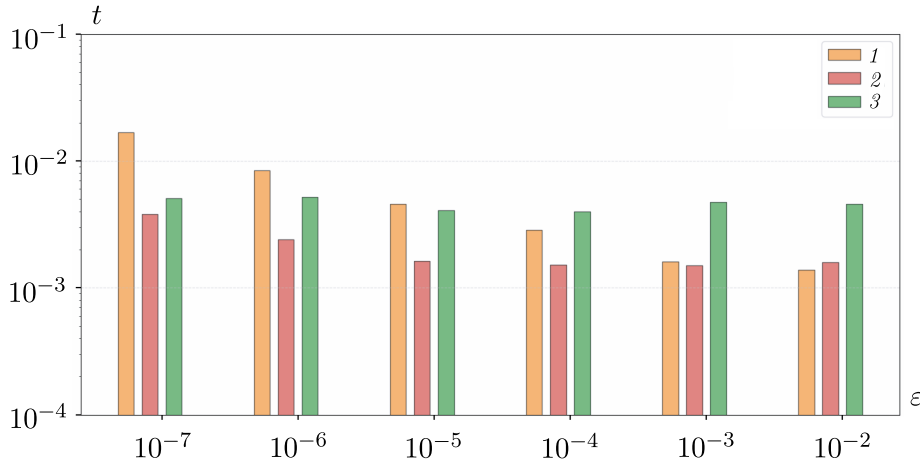


Рис. 6. Время решения Задачи 2 (4,2)-, (5,2)-методами и RADAU5;
1 — набор 1; 2 — набор 2; 3 — набор 3

— например, при исследовании образования оксида азота NO при горении метано-воздушной смеси $\text{CH}_4 + \text{H}_2 + \text{O}_2 + \text{N}_2$ [19]. В Приложении приведена задача Коши, соответствующая базовому механизму Коннова [13].

Данная задача оказалась достаточно трудной в смысле подбора приемлемых параметров ρ и h_0 для демонстрации конкурентоспособности процедур библиотеки CCODE. В приводимых ниже результатах полагалось $\rho = \rho(\varepsilon)$ и $h_0 = h_0(\varepsilon)$. При этом для $\varepsilon = 10^{-7}, \dots, \varepsilon = 10^{-3}$ имеем $h_0(\varepsilon) = 10^{-6}$ и $h_0(10^{-2}) = 10^{-5}$. Значения $\rho(\varepsilon)$ указаны в табл. 14. Отметим, что для этих параметров при $\varepsilon = 10^{-3}$ и $\varepsilon = 10^{-2}$ не работает (5,2)-метод. Параметры, при которых (5,2)-метод успешно решает задачу 3 для $\varepsilon = 10^{-3}$ будут приведены отдельно.

На рис. 7 приведены диаграммы, иллюстрирующие табл. 14 с переменным параметром ρ .

Для использованных выше параметров в табл. 15 приведены значения величины ε_{end} в конечный момент времени.

Табл. 15 показывает большую избыточную точность, т. е. решения основными и вложенными методами практически совпадают. При этом наилучшее время демонстрирует (5,2)-метод при заданной относительной ошибке $\varepsilon = 10^{-4}$ и значениях параметров $\rho = 10^{-7}$ и $h_0 = 10^{-6}$.

И, наконец, приведём значения параметров, при которых (5,2)-метод решает задачу 3 для погрешности $\varepsilon = 10^{-3}$. Это $\rho = 10^{-3}$ и $h_0 = 10^{-6}$. Для этих параметров время решения задачи

Таблица 13

Погрешность ε_{end} решения Задачи 2 (4,2)-, (5,2)-методами

ε	10^{-7}	10^{-6}	10^{-5}	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}
(4,2)-метод	$2.58 \cdot 10^{-9}$	$2.22 \cdot 10^{-7}$	$6.67 \cdot 10^{-6}$	$6.57 \cdot 10^{-7}$	$7.05 \cdot 10^{-4}$	$6.50 \cdot 10^{-6}$
(5,2)-метод	$8.54 \cdot 10^{-8}$	$2.20 \cdot 10^{-7}$	$1.16 \cdot 10^{-6}$	$2.12 \cdot 10^{-6}$	$2.41 \cdot 10^{-6}$	$2.41 \cdot 10^{-6}$

Таблица 14

Время решения Задачи 3 (4,2)-, (5,2)-методами и RADAU5.

ε	10^{-7}	10^{-6}	10^{-5}	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}
ρ	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-7}	10^{-5}	10^{-6}
(4,2)-метод	$2.06 \cdot 10^{-2}$	$2.20 \cdot 10^{-2}$	$2.27 \cdot 10^{-2}$	$3.41 \cdot 10^{-2}$	$5.05 \cdot 10^{-3}$	$6.31 \cdot 10^{-3}$
(5,2)-метод	$1.21 \cdot 10^{-2}$	$1.79 \cdot 10^{-2}$	$1.14 \cdot 10^{-2}$	$5.63 \cdot 10^{-3}$	—	—
RADAU5	$9.29 \cdot 10^{-3}$	$9.07 \cdot 10^{-3}$	$8.65 \cdot 10^{-3}$	$8.73 \cdot 10^{-3}$	$7.26 \cdot 10^{-3}$	$8.11 \cdot 10^{-3}$

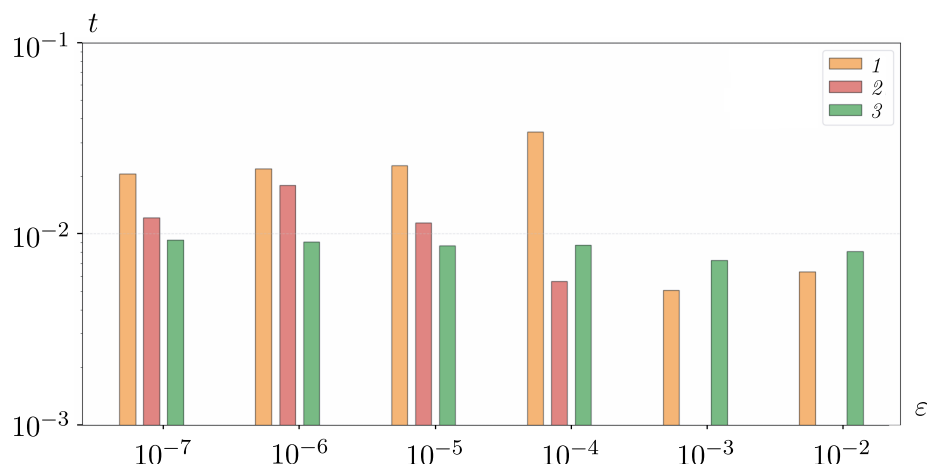


Рис. 7. Время решения Задачи 3 (4,2)-, (5,2)-методами и RADAU5;
1 — набор 1; 2 — набор 2; 3 — набор 3

составляет $2.32 \cdot 10^{-3}$ с, что существенно меньше, чем для (4,2)-метода и RADAU5 при $\rho = 10^{-5}$ и $h_0 = 10^{-6}$. Погрешность при тех же значениях параметров составляет $\varepsilon_{\text{end}} = 1.4 \cdot 10^{-16}$. Отметим, что для относительной ошибки $\varepsilon = 10^{-2}$ найти параметры, при которых (5,2)-метод даёт неотрицательное решение, не удалось.

5. Заключительные замечания

Основным результатом данной работы явилось создание библиотеки программ CCODE и демонстрация её функционирования на некоторых задачах химической кинетики. При этом на рассмотренных задачах производительность отдельных функций библиотеки на задаваемой относительной точности порядка 10^{-4} превосходит производительность программы RADAU5. Методической основой библиотеки явились L -устойчивые с внутренними L -устойчивыми процедурами (4,2)- и (5,2)-методы 3-го и 4-го порядка точности соответственно. Было проведено исследование по выбору наилучшего набора коэффициентов указанных методов на чрезвычайно жёсткой системе Робертсона, являющейся общепризнанным тестом для методов решения жёстких систем ОДУ. При этом все наборы коэффициентов, обеспечивающие указанные выше порядки точности, включены в библиотеку, и пользователю предоставлена возможность

Таблица 15

Погрешность ε_{end} решения Задачи 3 (4,2)-, (5,2)-методами

ε	10^{-7}	10^{-6}	10^{-5}	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}
ρ	10^{-3}	10^{-4}	10^{-5}	10^{-7}	10^{-5}	10^{-6}
(4,2)-метод	$3.7 \cdot 10^{-19}$	$2.5 \cdot 10^{-17}$	$1.1 \cdot 10^{-16}$	$2.1 \cdot 10^{-15}$	$1.2 \cdot 10^{-15}$	$1.9 \cdot 10^{-15}$
(5,2)-метод	$6.6 \cdot 10^{-21}$	$1.9 \cdot 10^{-19}$	$7.3 \cdot 10^{-19}$	$3.4 \cdot 10^{-16}$	—	—

самому выбрать наиболее подходящий набор для конкретной решаемой задачи.

Разработанная библиотека включает ряд возможностей, вскользь упомянутых и даже вообще не описанных в данной статье. В частности, наряду с заданием матрицы Якоби возможно использование процедуры *scoden*, в которой матрица Якоби вычисляется по известной правой части системы. В этом случае пользователь избавлен от довольно трудоёмкой процедуры задания матрицы, но, как указано в [20], теоретический порядок $(m, 2)$ -методов не превышает 3. Далее, в библиотеке предусмотрен режим “замораживания” матрицы Якоби, когда вычисления на нескольких шагах проводятся без перевычисления матрицы Якоби. Как и при аппроксимации матрицы Якоби, максимальный порядок точности $(m, 2)$ -методов с замораживанием не превышает 3 (см. [9]).

Развитие библиотеки CCODE связано, главным образом, с её расширением за счёт включения новых (m, k) -методов. В частности, речь идёт о $(6, 3)$ -методе 5-го порядка точности, а также $(3, 2)$ -методах 2-го порядка точности для решения задач с низкой требуемой точностью. Кроме того, возможно расширение библиотеки включением в неё алгоритмов переменного порядка точности без перевычисления матрицы Якоби. Отметим, что такого сорта алгоритм с переходом с $(4, 2)$ -метода на $(5, 2)$ -метод и обратно в настоящее время ещё не построен.

Приложение

Задача 1 (лазерный пиролиз этана [11]).

$$\begin{aligned}
 \frac{dy_1}{dt} &= -k_0 y_1 - k_1 y_1 y_2 - k_3 y_1 y_6 + k_5 y_4^2 \\
 \frac{dy_2}{dt} &= 2k_0 y_1 - k_1 y_1 y_2 - k_4 y_2 y_5 + k_0 y_8 \\
 \frac{dy_3}{dt} &= k_1 y_1 y_2 \\
 \frac{dy_4}{dt} &= k_1 y_1 y_2 - k_2 y_4 + k_0 y_5 y_6 + k_3 y_1 y_6 - 2k_5 y_4^2 \\
 \frac{dy_5}{dt} &= k_2 y_4 - k_0 y_5 y_6 - k_4 y_2 y_5 + k_0 y_8 + k_5 y_4^2 \\
 \frac{dy_6}{dt} &= k_2 y_4 - k_0 y_5 y_6 - k_3 y_1 y_6 \\
 \frac{dy_7}{dt} &= k_3 y_1 y_6 \\
 \frac{dy_8}{dt} &= k_4 y_2 y_5 - k_0 y_8,
 \end{aligned}$$

где $0 < t \leq 100$ с, скорости реакций задаются в соответствии с законом Аррениуса

$$k_\alpha = A_\alpha \exp(-E_\alpha/RT),$$

где T – температура, A_α – предэкспоненциальный множитель, E_α – энергия активации, R – универсальная газовая постоянная. Значения параметров скоростей реакций:

$$\begin{array}{ll}
 A_0 = 10^{16} \text{ с}^{-1}, & E_0/R = 4.27283832 \cdot 10^4 \text{ K} \\
 A_1 = 10^{10} \text{ с}^{-1}, & E_1/R = 5.93449766 \cdot 10^3 \text{ K} \\
 A_2 = 10^{13.5} \text{ с}^{-1}, & E_2/R = 2.01772921 \cdot 10^4 \text{ K} \\
 A_{02} = 10^{10.4} \text{ с}^{-1}, & E_{02}/R = 9.96995607 \cdot 10^2 \text{ K} \\
 A_3 = 10^{11} \text{ с}^{-1}, & E_3/R = 4.74759813 \cdot 10^3 \text{ K} \\
 A_4 = 10^{8.5} \text{ с}^{-1}, & E_4/R = 3.91676846 \cdot 10^3 \text{ K} \\
 A_{04} = 10^{13.9} \text{ с}^{-1}, & E_{04}/R = 1.62605236 \cdot 10^4 \text{ K} \\
 A_5 = 10^{11.5} \text{ с}^{-1}, & E_5/R = 9.96995607 \cdot 10^2 \text{ K}
 \end{array}$$

Начальные условия задаются равенствами:

$$y_1(0) = 12.1875/T, \quad y_2(0) = \dots = y_8(0) = 0.$$

Задача 2 (реакция H_2/O_2 [12]).

$$\begin{aligned}
 \frac{dy_1}{dt} = & -k_1 y_1 y_2 - k_2 y_1 y_4 - k_3 y_1 y_5 - k_{024} y_1 y_7 - k_{019} y_1 y_{11} \\
 & + k_{02} y_3 y_5 + k_{03} y_3 y_6 + k_{19} y_3 y_{10} + k_{24} y_3 y_{11} + k_{01} y_2 y_3^2,
 \end{aligned}$$

$$\frac{dy_2}{dt} = 0,$$

$$\begin{aligned}
 \frac{dy_3}{dt} = & 2k_1 y_1 y_2 + k_2 y_1 y_4 + k_3 y_1 y_5 + k_{024} y_1 y_7 + k_{019} y_1 y_{11} + k_{06} y_2 y_6 + k_{08} y_2 y_5 + k_{09} y_2 y_8 \\
 & - k_{02} y_3 y_5 - k_{03} y_3 y_6 - (k_5 + k_{30}) y_3 y_7 - (k_{18} + k_{19}) y_3 y_{10} - (k_{23} + k_{24}) y_3 y_{11} \\
 & + k_{05} y_4 y_5 + k_{018} y_5 y_6 + k_{023} y_5^2 - (k_8 + k_9) y_2 y_3 y_4 - k_6 y_2 y_3 y_5 - 2k_{01} y_2 y_3^2 + k_{030} y_{11},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{dy_4}{dt} = & -k_2 y_1 y_4 + 2k_{04} y_2 y_7 + k_{08} y_2 y_5 + k_{09} y_2 y_8 + k_{02} y_3 y_5 + k_5 y_3 y_7 - k_{05} y_4 y_5 - k_7 y_4 y_6 \\
 & - k_{20} y_4 y_{10} - k_{25} y_4 y_{11} + k_{025} y_5 y_7 + k_{020} y_5 y_{11} + k_{07} y_5^2 - (k_8 + k_9) y_2 y_3 y_4 - 2k_4 y_2 y_4^2,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{dy_5}{dt} = & k_2 y_1 y_4 - (k_3 + k_{011}) y_1 y_5 + k_{11} y_1 y_8 - k_{08} y_2 y_5 + k_{06} y_2 y_6 + k_{03} y_3 y_6 - (k_{02} + k_{013}) y_3 y_5 \\
 & + k_5 y_3 y_7 + k_{13} y_3 y_8 + k_{18} y_3 y_{10} + 2k_{23} y_3 y_{11} - k_{05} y_4 y_5 + 2k_7 y_4 y_6 + k_{20} y_4 y_{10} + k_{25} y_4 y_{11} \\
 & - (k_{010} + k_{018}) y_5 y_6 - (k_{016} + k_{025}) y_5 y_7 + k_{12} y_5 y_8 - k_{014} y_5 y_9 - (k_{020} + k_{26} + k_{27}) y_5 y_{11} \\
 & + (k_{026} + k_{027}) y_6 y_7 + k_{10} y_6 y_8 + (k_{021} + k_{022}) y_6 y_{11} + k_{16} y_7 y_8 + k_{14} y_8 y_9 + k_8 y_2 y_3 y_4 \\
 & - k_6 y_2 y_3 y_5 - (2k_{07} + k_{012} + 2k_{017} + 2k_{023}) y_5^2 - k_{015} y_5 + k_{15} y_8 + 2k_{17} y_{10},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \frac{dy_6}{dt} = & k_3 y_1 y_5 - k_{06} y_2 y_6 - k_{03} y_3 y_6 + k_{18} y_3 y_{10} - k_7 y_4 y_6 - k_{018} y_5 y_6 + (k_{21} + k_{22}) y_5 y_{10} \\
 & + (k_{26} + k_{27}) y_5 y_{11} - (k_{026} + k_{027}) y_6 y_7 - (k_{021} + k_{022}) y_6 y_{11} + k_6 y_2 y_3 y_5,
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{dy_7}{dt} = & -k_{024}y_1y_7 - k_{04}y_2y_7 - (k_5 + k_{30})y_3y_7 + k_{24}y_3y_{11} + k_{05}y_4y_5 + k_{25}y_4y_{11} - k_{025}y_5y_7 \\ & + (k_{26} + k_{27})y_5y_{11} - k_{027}y_6y_7 - (k_{028} + k_{029})y_7y_{10} + k_{28}y_{10}^2 + k_{29}y_{11}^2 + k_4y_1y_4^2 + k_{030}y_{11},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{dy_8}{dt} = & -k_{11}y_1y_8 + k_{011}y_1y_5 - k_{09}y_2y_8 - k_{13}y_3y_8 + k_{013}y_3y_5 \\ & + k_{010}y_5y_6 + k_{016}y_5y_7 - k_{12}y_5y_8 + k_{014}y_5y_9 - k_{10}y_6y_8,\end{aligned}$$

$$\frac{dy_9}{dt} = 0,$$

$$\begin{aligned}\frac{dy_{10}}{dt} = & k_{019}y_1y_{11} - (k_{18} + k_{19})y_3y_{10} - k_{20}y_4y_{10} + k_{018}y_5y_6 - (k_{21} + k_{22})y_5y_{10} + k_{021}y_6y_{11} \\ & + (k_{020} + k_{022})y_5y_{11} - (k_{028} + k_{029})y_7y_{10} + (k_{28} + k_{29})y_{11}^2 + k_{017}y_5^2 - k_{17}y_{10},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{dy_{11}}{dt} = & k_{024}y_1y_7 - k_{019}y_1y_{11} + k_{30}y_3y_7 + k_{19}y_3y_{10} - (k_{23} + k_{24})y_3y_{11} + k_{20}y_4y_{10} - k_{25}y_4y_{11} \\ & + k_{025}y_5y_7 + (k_{21} + k_{22})y_5y_{10} - y_5y_{11} - (k_{020} + k_{26} + k_{27})y_5y_{11} + (k_{026} + k_{027})y_6y_7 \\ & - (k_{021} + k_{022})y_6y_{11} + 2(k_{028} + k_{029})y_7y_{10} + k_{023}y_5^2 - 2(k_{28} + k_{29})y_{10}^2 - k_{030}y_{11},\end{aligned}$$

где $0 < t \leq 200$ с. Значения скоростей реакций (1/с):

$k_1 = 1.21 \cdot 10^{-17},$	$k_{01} = 1.09 \cdot 10^{15},$	$k_{16} = 7.83 \cdot 10^{13},$	$k_{016} = 9.25 \cdot 10^{-16},$
$k_2 = 2.18 \cdot 10^{10},$	$k_{02} = 2.81 \cdot 10^{10},$	$k_{17} = 4.38 \cdot 10^{-1},$	$k_{017} = 9.59 \cdot 10^{12},$
$k_3 = 2.88 \cdot 10^{11},$	$k_{03} = 3.29 \cdot 10^7,$	$k_{18} = 1.39 \cdot 10^{12},$	$k_{018} = 3.86 \cdot 10^{-11},$
$k_4 = 2.33 \cdot 10^{14},$	$k_{04} = 5.21 \cdot 10^{-22},$	$k_{19} = 2.02 \cdot 10^{11},$	$k_{019} = 3.61 \cdot 10^5,$
$k_5 = 1.76 \cdot 10^9,$	$k_{05} = 1.13 \cdot 10^{13},$	$k_{20} = 2.70 \cdot 10^{11},$	$k_{020} = 6.22 \cdot 10^5,$
$k_6 = 7.14 \cdot 10^{16},$	$k_{06} = 9.09 \cdot 10^{-20},$	$k_{21} = 1.38 \cdot 10^{12},$	$k_{021} = 2.84 \cdot 10^2,$
$k_7 = 9.89 \cdot 10^7,$	$k_{07} = 1.11 \cdot 10^{12},$	$k_{22} = 4.08 \cdot 10^{11},$	$k_{022} = 8.37 \cdot 10,$
$k_8 = 6.73 \cdot 10^{15},$	$k_{08} = 9.65 \cdot 10^{-17},$	$k_{23} = 5.73 \cdot 10^{13},$	$k_{023} = 7.77,$
$k_9 = 2.05 \cdot 10^{11},$	$k_{09} = 2.48 \cdot 10^8,$	$k_{24} = 9.22 \cdot 10^{12},$	$k_{024} = 1.51 \cdot 10^{-4},$
$k_{10} = 2.91 \cdot 10^{14},$	$k_{010} = 3.44 \cdot 10^{-15},$	$k_{25} = 3.25 \cdot 10^{13},$	$k_{025} = 6.88 \cdot 10^{-4},$
$k_{11} = 1.07 \cdot 10^{14},$	$k_{011} = 1.27 \cdot 10^{-15},$	$k_{26} = 1.54 \cdot 10^{13},$	$k_{026} = 2.89 \cdot 10^{-8},$
$k_{12} = 2.75 \cdot 10^{14},$	$k_{012} = 3.25 \cdot 10^{-15},$	$k_{27} = 1.74 \cdot 10^{11},$	$k_{027} = 3.27 \cdot 10^{-10},$
$k_{13} = 3.91 \cdot 10^{13},$	$k_{013} = 4.62 \cdot 10^{-16},$	$k_{28} = 3.57 \cdot 10^{10},$	$k_{028} = 3.28 \cdot 10^{-1},$
$k_{14} = 8.65 \cdot 10^{10},$	$k_{014} = 1.02 \cdot 10^{-18},$	$k_{29} = 5.23 \cdot 10^{11},$	$k_{029} = 4.80,$
$k_{15} = 1.45 \cdot 10^6,$	$k_{015} = 1.71 \cdot 10^{-23},$	$k_{30} = 8.30 \cdot 10^{13},$	$k_{030} = 5.62 \cdot 10^{-2}.$

Начальные условия:

$$\begin{aligned}y_1(0) &= 2.32 \cdot 10^{-3}, \quad y_7(0) = 1.16 \cdot 10^{-3}, \quad y_9(0) = 1.39 \cdot 10^{-1}, \\ y_2(0) &= \dots = y_6(0) = y_8(0) = y_{10}(0) = y_{11}(0) = 0.\end{aligned}$$

Задача 3 (горение малых углеводородов [13]).

$$\begin{aligned}\frac{dy_1}{dt} = & -k_{16}y_1y_6 - (k_{20} + k_{21} + k_{22})y_1y_9 - (k_{29} + k_{30})y_1y_{11} - k_7y_2y_8 + k_{15}3y_3y_5 \\ & + k_{17}3y_3y_7 + k_8y_8^2 - k_{11}y_1y_6^2 - 2k_1y_2y_1^2 - 2k_2y_3y_1^2 - 2k_3y_4y_1^2 - 2k_4y_1^3 - k_6y_1y_2y_5 \\ & - k_9y_1y_2y_6 - k_{12}y_1y_6y_8 - k_{10}y_1y_6y_{10},\end{aligned}$$

$$\frac{dy_2}{dt} = 0,$$

$$\frac{dy_3}{dt} = k_{22}y_1y_9 + k_{29}y_1y_{11} - k_{15}y_3y_5 - k_{23}y_3y_6 - k_{17}y_3y_7 + k_1y_2y_1^2 + k_2y_3y_1^2 + k_3y_4y_1^2 + k_4y_1^3,$$

$$\frac{dy_4}{dt} = 0,$$

$$\frac{dy_5}{dt} = k_{16}y_1y_6 + k_{21}y_1y_9 - k_{15}y_3y_5 - k_{19}y_5y_9 - k_{31}y_5y_{11} + k_{18}y_7^2 - 2k_5y_2y_5^2 - k_6y_1y_2y_5,$$

$$\begin{aligned}\frac{dy_6}{dt} = & -k_{16}y_1y_6 + k_{22}y_1y_9 - k_{23}y_3y_6 + k_{19}y_6y_9 + (k_{24} + k_{25})y_7y_9 + (k_{26} + k_{27})y_9^2 - k_{11}y_1y_6^2 \\ & + k_5y_2y_5^2 + k_{28}y_2y_9^2 - k_9y_1y_2y_6 - k_{12}y_1y_6y_8 - k_{10}y_1y_6y_{10},\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{dy_7}{dt} = & k_{16}y_1y_6 + 2k_{20}y_1y_9 + k_{30}y_1y_{11} + k_{15}y_2y_5 + k_7y_2y_8 + 2k_{23}y_3y_6 - k_{17}y_3y_7 \\ & + k_{19}y_5y_9 + k_{31}y_5y_{11} - (k_{24} + k_{25})y_7y_9 - (k_{32} + k_{33})y_7y_{11} - 2k_{18}y_7^2 \\ & + k_8y_8^2 - 2k_{13}y_2y_7^2 - 2k_{14}y_8y_7^2 + k_6y_1y_2y_5,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{dy_8}{dt} = & k_{21}y_1y_9 + k_{30}y_1y_{11} - k_7y_2y_8 + k_{17}y_3y_7 + (k_{24} + k_{25})y_7y_9 \\ & + (k_{32} + k_{33})y_7y_{11} + k_{18}y_7^2 - k_8y_8^2,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{dy_9}{dt} = & -(k_{20} + k_{21} + k_{22})y_1y_9 + k_{29}y_1y_{11} - k_{19}y_5y_9 + k_{31}y_5y_{11} - (k_{24} + k_{25})y_7y_9 + k_{11}y_1y_6^2 \\ & + (k_{32} + k_{33})y_7y_{11} - 2(k_{26} + k_{27} + k_{28})y_9^2 + k_9y_1y_2y_6 + k_{12}y_1y_6y_8 + k_{10}y_1y_6y_{10},\end{aligned}$$

$$\frac{dy_{10}}{dt} = 0,$$

$$\begin{aligned}\frac{dy_{11}}{dt} = & -(k_{29} + k_{30})y_1y_{10} - k_{31}y_4y_{10} - (k_{32} + k_{33})y_6y_{10} \\ & + (k_{26} + k_{27})y_8^2 + k_{13}y_1y_6^2 + k_{28}y_1y_8^2 + k_{14}y_7y_6^2,\end{aligned}$$

где $0 < t \leq 10$ с. Значения скоростей реакций (1/с):

$$\begin{array}{lll}k_1 = 2.10 \cdot 10^{15}, & k_{12} = 2.89 \cdot 10^{13}, & k_{23} = 2.95 \cdot 10^2, \\ k_2 = 3.06 \cdot 10^{15}, & k_{13} = 9.79 \cdot 10^{12}, & k_{24} = 3.46 \cdot 10^{13}, \\ k_3 = 2.84 \cdot 10^{15}, & k_{14} = 9.79 \cdot 10^{12}, & k_{25} = 1.67 \cdot 10^{13},\end{array}$$

$$\begin{array}{lll}
k_4 = 3.20 \cdot 10^{15}, & k_{15} = 3.37 \cdot 10^{10}, & k_{26} = 1.91 \cdot 10^{12}, \\
k_5 = 3.00 \cdot 10^{14}, & k_{16} = 5.07 \cdot 10^{11}, & k_{27} = 3.22 \cdot 10^{11}, \\
k_6 = 2.03 \cdot 10^{16}, & k_{17} = 3.74 \cdot 10^{11}, & k_{28} = 1.38 \cdot 10^{15}, \\
k_7 = 3.26, & k_{18} = 7.59 \cdot 10^{10}, & k_{29} = 4.38 \cdot 10^{11}, \\
k_8 = 1.25 \cdot 10, & k_{19} = 1.91 \cdot 10^{13}, & k_{30} = 2.75 \cdot 10^{12}, \\
k_9 = 4.76 \cdot 10^{13}, & k_{20} = 1.38 \cdot 10^{14}, & k_{31} = 2.52 \cdot 10^{11}, \\
k_{10} = 4.76 \cdot 10^{13}, & k_{21} = 1.45 \cdot 10^{12}, & k_{32} = 1.71 \cdot 10^{12}, \\
k_{11} = 4.76 \cdot 10^{13}, & k_{22} = 5.01 \cdot 10^{13}, & k_{33} = 4.15 \cdot 10^{13},
\end{array}$$

Начальные условия:

$$\begin{aligned}
y_3(0) &= 4.88 \cdot 10^{-3}, & y_6(0) &= 2.44 \cdot 10^{-3}, & y_{10}(0) &= 2,93 \cdot 10^{-2}, \\
y_1(0) &= y_2(0) = y_4(0) = y_5(0) = y_7(0) = y_8(0) = y_9(0) = y_{11}(0) = 0.
\end{aligned}$$

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках научной программы Национального центра физики и математики, направление №2 «Математическое моделирование на супер-ЭВМ экса- и зеттапроизводительности. Этап 2023–2025». 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. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жёсткие и дифференциально-алгебраические задачи. М.: Мир, 1999. Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems. Berlin – Heidelberg: Springer-Verlag, 1991. /
2. Деулин А.А., Глазунов В.А., и др. Подходы к моделированию кинетики химических реакций в пакете программ «ЛОГОС» // Сб. тезисов XXV Международной конференции по химическим реакторам (ХИМПРЕАКТОР-25). Новосибирск, 2023. С. 55.
3. Новиков Е.А., Шитов Ю.А., Шокин Ю.И. Одношаговые безытерационные методы решения жёстких систем // Докл. АН СССР. 1988. Т. 301, № 6. С. 1310–1314.
4. Новиков Е.А., Шитов Ю.А., Шокин Ю.И. О классе (m, k) -методов решения жёстких систем // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 1989. Т. 29, № 2. С. 194–201.
5. Новиков Е.А. Исследование $(m, 2)$ -методов решения жёстких систем // Вычислительные технологии. 2007. Т. 12, № 5. С. 103–115.
6. Новиков Е.А., Двинский А.Л. $(4, 2)$ -метод третьего порядка для решения жёстких систем // Вычислительные технологии. 2001. Т. 6. Ч. 2. Спец. выпуск. С. 470–474.
7. Новиков Е.А., Двинский А.Л. $(5, 2)$ -метод с внутренней L -устойчивостью для жёстких систем // Вестник КрасГАУ. Ресурсосберегающие технологии. 2005. № 3. С. 95–100.
8. Новиков Е.А. Оценка глобальной ошибки A -устойчивых методов решения жёстких систем // Докл. РАН. 1995. Т. 343, № 4. С. 452–455.
9. Двинский А.Л. Исследование (m, k) -методов с L -устойчивыми промежуточными схемами для решения жёстких систем // Дис... канд. физ.-мат. наук. Красноярск, 2004.
10. Robertson H.H. The solution of a set of reaction rate equations // Numerical Analysis, An Introduction, J. Walsh, ed. New York: Academic Press, 1966. P. 178–182.

11. *Snytnikov V.N, Mischenkoa T.I., Snytnikov V.I.N., Chernykh I.G.* A reactor for the study of homogeneous processes using laser radiation energy // *Chemical Engrg. J.* 2009. V. 150. P. 231–236.
12. *Burke M.P., Chaos M., Ju Y., Dryer F.L., Klippenstein S.J.* Comprehensive H₂/O₂ kinetic model for high-pressure combustion // *Int. J. of Chemical Kinetics.* 2011. V. 44, Iss. 7. P. 444–474.
13. *Konnov A.A.* Detailed reaction mechanism for small hydrocarbons combustion. Release 0.5 // <http://homepages.vub.ac.be/~akonnov/>, 2000.
14. *Radhakrishnan K., Hindmarsh A.C.* Description and Use of LSODE, the Livermore Solver for Ordinary Differential Equations // NASA Reference Publication 1327, Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL-ID-113855, 1993.
15. *Brown P.N., Byrne G.D., Hindmarsh A.C.* VODE, A Variable- Coefficient ODE Solver // *SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 1989. V. 10. P. 1038–1051.
16. *Gear C.W.* The automatic integration of ordinary differential equations // *Communications of the ACM.* 1971. V. 14, N 3. P. 176–179.
17. *Hairer E.* Testset for Stiff ODEs // <https://www.unige.ch/hairer/testset/testset.html>.
18. *Черных И.Г.* Алгоритмический и программный инструментарий для численного решения прямых задач химической кинетики с использованием супер-ЭВМ // Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Новосибирск, 2006.
19. *Coppens F.H.V., De Ruyck J., Konnov A.A.* The effects of composition on burning velocity and nitric oxide formation in laminar premixed flames of CH₄ + H₂ + O₂ + N₂ // *Combustion and Flame.* 2007. V. 149. P. 409–417.
20. *Новиков Е.А.* Аппроксимация матрицы Якоби в $(m, 2)$ -методах решения жёстких задач // *Журн. вычисл. математики и матем. физики.* 2011. Т. 51, № 12. С. 2194–2208.

UDC 519.622.2

CCODE LIBRARY OF PROGRAMS FOR SOLVING STIFF SYSTEMS OF ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS

© 2025 K. P. Saktoeva^a, Yu. M. Laevsky^b

*Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics SB RAS
Prosp. Acad. Lavrentieva, 6, Novosibirsk 630090, Russia*

E-mails: ^asaktoeva33@gmail.com, ^blaev@labchem.sccc.ru

Received 24.05.2025, revised 17.06.2025, accepted 17.09.2025

Abstract. The paper deals the software library for solving stiff systems of ordinary differential equations, based on variable-step integration (m,k)-methods and tested on several systems from chemical kinetics area. The paper focuses on selecting the most efficient schemes and comparing their performance with the widely used RADAU5 program.

Keywords: software library, stiff systems, one-step methods, chemical kinetics, numerical experiment.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2025.28.306

REFERENCES

1. Hairer E., Wanner G. Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems. Berlin – Heidelberg: Springer-Verlag, 1991.
2. Deulin A.A., Glazunov V.A., i dr. Podhody k modelirovaniyu kinetiki himicheskikh reakciy v pakete programm “LOGOS” [Approaches to modeling the kinetics of chemical reactions in the LOGOS software package]. *Sb. tezisov XXV Mejdunarodnoy konferencii po himicheskim reaktoram (HIMREAKTOR-25)* [Abstracts of the XXV International Conference on Chemical Reactors (KHIMREAKTOR-25)]. Novosibirsk, 2023, pp. 55 (in Russian).
3. Novikov E.A., Shitov Yu.A., Shokin Yu.I. Odnoshagovye beziteracionnye metody resheniya zhestkih sistem [Single-step, non-iterative methods for solving stiff systems]. *Dokl. AN USSR*, 1988, Vol. 301, No. 6, pp. 1310–1314 (in Russian).
4. Novikov E.A., Shitov Yu.A., Shokin Yu.I. O klasse (m,k)-metodov resheniya zhestkih sistem [A class of (m, k)-methods for solving stiff systems. *Zhurn. Vychisl. Matemat. i Matemat. Fiziki*. [J. Calculation. Math. Math. Phys.], 1989, Vol. 29, No. 2, pp. 194–201 (in Russian).
5. Novikov E.A. Issledovanie (m,2)-metodov resheniya zhestkih sistem [Investigation of (m,2)-methods for solving stiff systems]. *Vychisl. Tekhnol.* [Comput. Technol.], 2007, Vol. 12, No. 5, pp. 103–115 (in Russian).
6. Novikov E.A., Dvinskiy A.L. (4, 2)-metod tretogo poryadka dlya resheniya zhestkih sistem [The third-order (4,2) method for solving stiff systems]. *Vychisl. Tekhnol.* [Comput. Technol.], 2001, Vol. 6, Part 2, Spec. Vypusk, pp. 470–474 (in Russian).
7. Novikov E.A., Dvinskiy A.L. (5, 2)-metod s vnutrenney L-ustoychivostyu dlya zhestkih sistem [The (5, 2) method with internal L-stability for stiff systems]. *Vestn. KrasGAU. Resursosberegayuschie Tehnologii* [Bull. KrasGAU. Resource-Saving Technol.], 2005, No. 3, pp. 95–100 (in Russian).
8. Novikov E.A. Ocenka globalnoy oshibki A-ustoychivyh metodov resheniya zhestkih sistem [Global error estimation of A-stable methods for solving stiff system]. *Dokl. RAN*, 1995, Vol. 43, No. 4, pp. 452–455 (In Russian).

9. Dvinskiy A.L. Issledovanie $(m, 2)$ -metodov s L-ustoychivymi promezhutochnymi shemami dlya resheniya zhestkih sistem [A study of (m, k) methods with L-stable intermediate schemes for solving stiff systems]. Diss. ... kand. fiz.-mat. nauk. Krasnoyarsk, 2004 (in Russian).
10. Robertson H.H. The solution of a set of reaction rate equations. *Numerical Analysis, An Introduction*, J. Walsh, ed. New York: Academic Press, 1966, pp. 178–182.
11. Snytnikov V.N., Mischenko T.I., Snytnikov V.I., Chernykh I.G. A reactor for the study of homogeneous processes using laser radiation energy. *Chemical Engrg. J.*, 2009, Vol. 150, pp. 231–236.
12. Burke M.P., Chaos M., Ju Y., Dryer F.L., Klippenstein S.J. Comprehensive H₂/O₂ kinetic model for high-pressure combustion. *Inter. J. Chemical Kinetics*, 2011, Vol. 44, Iss. 7, pp. 444–474.
13. Konnov A.A. Detailed reaction mechanism for small hydrocarbons combustion. Release 0.5, 2000, <http://homepages.vub.ac.be/~akonnov/>
14. Radhakrishnan K., Hindmarsh A.C. Description and Use of LSODE, the Livermore Solver for Ordinary Differential Equations. NASA Reference Publication 1327, Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL-ID-113855, 1993.
15. Brown P.N., Byrne G.D., Hindmarsh A.C. VODE, A Variable- Coefficient ODE Solver. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, 1989, Vol. 10, pp. 1038–1051.
16. Gear C.W. The automatic integration of ordinary differential equations. *Communications of the ACM*, 1971, Vol. 14, No. 3, pp. 176–179.
17. Hairer E. Testset for Stiff ODEs. <https://www.unige.ch/~hairer/testset/testset.html>.
18. Chernykh I.G. Algoritmicheskiy i programmnyy instrumentariy dlya chislennogo resheniya pryamykh zadach himicheskoy kinetiki s ispolzovaniem super-komputer [Algorithmic and software tools for the numerical solution of direct problems of chemical kinetics using supercomputers]. Diss. ... kand. fiz.-mat. nauk. Novosibirsk, 2006 (in Russian).
19. Coppens F.H.V. , De Ruyck J., Konnov A.A. The effects of composition on burning velocity and nitric oxide formation in laminar premixed flames of CH₄ + H₂ + O₂ + N₂. *Combustion and Flame*, 2007, Vol. 149, pp. 409–417.
20. Novikov E.A. Approksimatsiya matricy Jacoby in $(m, 2)$ -metodah resheniya zhestkih zadach [Approximation of the Jacobian matrix in $(m, 2)$ -methods for solving stiff problems]. *Zhurn. Vychisl. Matematiki i Mat. Fiziki* [J. Calculation. Math. Math. Phys.], 2011, Vol. 51, No. 12, pp. 2194–2208 (in Russian).

УДК 532.5

РАЗВИТИЕ ПОРОСЕТЕВОГО ПОДХОДА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПЕРЕНОСА МОДИФИЦИРУЮЩИХ ДОБАВОК В ПРОЦЕССЕ НЕФТЕВЫТЕСНЕНИЯ

© 2025 С. А. Филимонов^{1,2a}, А. В. Минаков^{1,2b}

¹Сибирский федеральный университет,
просп. Свободный, 79, г. Красноярск 660041, Россия

²Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН,
просп. Акад. Лаврентьева, 1, г. Новосибирск 630090, Россия

E-mails: ^asfilimonov@sfu-kras.ru, ^baminakov@sfu-kras.ru

Поступила в редакцию 10.06.2024 г.; после доработки 10.07.2025 г.;
принята к публикации 17.09.2025 г.

Представлены результаты разработки оригинальной математической модели и программного модуля для поросетевого моделирования переноса модифицирующих добавок (растворы ПАВ и наночастиц) в процессе вторичного заводнения нефтеносных пластов. В рамках двухфазного поросетевого подхода реализовано моделирование конвективно-диффузионного механизма переноса модифицирующей добавки в пределах водной фазы с учётом влияния локальной концентрации добавки на вязкость, межфазное натяжение и краевой угол смачивания. За счёт применения оригинального подхода добавления фиктивных узлов на ветви удалось существенно уменьшить влияние численной диффузии, характерной для моделей конвективно-диффузионного переноса в сетевых задачах. В результате тестирования на решении одномерной конвективно-диффузионной задачи с аналитическим решением показана удовлетворительная разрешающая способность предложенного расчётного алгоритма.

Ключевые слова: поросетевая модель, перенос и диффузия модифицирующей добавки, ПАВ, заводнение пласта, тестирование.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2025.28.307

ВВЕДЕНИЕ

Течение многофазной жидкости в пористых средах является одним из значимых процессов, происходящих в природе и технологиях. Большим блоком в проблематике течения многофазной жидкости в пористых средах являются процессы вытеснения нефти из природных резервуаров. Одним из распространённых методов добычи нефти из месторождений с трудноизвлекаемыми запасами является заводнение пласта, при котором нефть из пористой среды вытесняется водой. При этом современные методы добычи позволяют извлечь от 20 до 40% процентов нефти, а остальное остаётся в породе. Одним из способов увеличения нефтеотдачи является заводнение с использованием различных добавок, модифицирующих физико-химические свойства (такие как смачивание, коэффициент межфазного натяжения, вязкость и др.). В качестве модифицирующих добавок могут выступать растворы полимеров, поверхностно-активные вещества (ПАВ) или наноматериалы. Для изучения влияния модифицирующих добавок на процесс вытеснения нефти из образца горной породы, в первую очередь, используются разнообразные экспериментальные методы [1, 2, 3]. Результаты этих исследований показывают, что изменение физико-химических свойств вытесняющей жидкости существенно влияет на эффективность вытеснения нефти.

Кроме того, одним из основных методов исследования влияния добавок на механизмы вытеснения нефти является численное моделирование. Существует три основных подхода для моделирования процесса вытеснения нефти: метод решёточных уравнений Больцмана [4], методы вычислительной гидродинамики [5, 6] и поросетовые методы. Первые два подхода позволяют смоделировать процесс вытеснения нефти из образца с детальным описанием геометрии порового пространства и прямым разрешением фронта вытеснения. Однако, такие подходы требуют значительных вычислительных затрат и использование суперкомпьютеров [7]. Более эффективным с точки зрения использования вычислительных ресурсов способом моделирования процесса вытеснения нефти является поросетовое моделирование [8, 9]. Такой подход позволяет моделировать керн (образец горной породы), состоящий из нескольких миллионов пор [10]. Суть поросетевого моделирования — это представление порового пространства в виде графа, состоящего из набора узлов и соединяющих его ветвей. В узлах выполняется закон сохранения массы, а на ветвях — закон сохранения количества движения.

Поросетовые методы активно развиваются и усложняются. В последнее время появились работы, в которых с помощью поросетевого моделирования попытались учесть влияние модифицирующих добавок на характеристики нефтевытеснения. Так, в работе [11] представлено исследование влияния различных растворов ПАВ на эффективность закачки CO_2 в пористую среду. В работе [12] при помощи динамической поросетовой модели [13] удалось довольно точно описать эксперимент [2] по влиянию добавки полимера на коэффициент нефтевытеснения. Однако, в большинстве работ используется приближение, при котором свойства вытесняющей жидкости являются однородными, и концентрация добавки не меняется ни во времени, ни в объёме пористой среды в процессе вытеснения. Ранее нашим коллективом была разработана подобная поросетовая модель для динамического моделирования процесса вытеснения нефти [14], которая позволяет описать процесс вытеснения нефти жидкостью с постоянными физическими свойствами (вязкость, межфазное натяжение и краевой угол смачиваемости). В данной статье представлены результаты развития этой модели. Разработана оригинальная математическая модель и реализован программный модуль для поросетевого моделирования переноса модифицирующих добавок в процессе заводнения. В рамках поросетевого подхода реализована модель конвективно-диффузионного механизма переноса локальной концентрации модифицирующей добавки в пределах водной фазы, с учётом влияния добавки на вязкость, межфазное натяжение и краевой угол смачивания.

1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Предложенная математическая модель описывает одновременно два физических процесса, происходящих в поровом пространстве. Первый процесс — это вытеснение нефти вытесняющей жидкостью (водная фаза). Второй процесс — это перенос модифицирующей добавки в объёме вытесняющей жидкости. При этом вытесняющая жидкость и нефть не смешиваются, а концентрация модифицирующей добавки меняется только в пределах вытесняющей жидкости. Рассматривается двухфазное несмешивающееся течение. Жидкость, краевой угол для которой меньше 90° градусов, будем называть «смачивающей», другую жидкость — «несмачивающей». Для определённости принято, что водный раствор с добавкой — это фаза 1, а нефть — фаза 2. Распределение жидкостей внутри порового пространства задаётся объёмной долей фаз. Объёмную долю водной фазы обозначим как φ . Таким образом, объёмная доля нефти определяется как $1 - \varphi$. Содержание модифицирующей добавки внутри водной фазы задаётся массовой концентрацией c . Представленная модель базируется на разработанной ранее математической модели для сетевого моделирования процесса вытеснения нефти [14]. Реализован поршневой режим течения при котором граница раздела фаз перпендикулярна потоку и нет протекания смачиваемой жидкости по стенкам и в углах канала. В элементах сети, где присутствуют обе фазы, физические свойства (плотность и вязкость) определяются по правилу смеси.

Математическую модель, которая описывает процесс вытеснения нефти из резервуара можно разбить на две части:

- 1) гидравлическая модель, определяющая распределение давления и расходов в сети;
- 2) модель переноса водной фазы по сети.

1.1. Гидравлическая модель

Первую часть модели возьмём из сетевой части гибридного алгоритма [15], в дальнейшем это позволит реализовать гибридный 1D–3D алгоритм для моделирования процесса вытеснения нефти из образцов с трещинами. Течение жидкости по системе будем рассматривать на ориентированном графе, узлы которого обозначим как поры, а ветки (рёбра) графа как каналы. Для описания сетевой модели введём соответствующие обозначения: множество узлов обозначим N , множество ветвей (каналов) — U . Пусть O_i является подмножеством ветвей, начинающихся в i -том узле, а I_i — подмножеством ветвей, заканчивающихся в i -том узле. С каждой ветвью соотносится пара узлов с принятым обозначением N_{in} — начальный узел и N_{out} — конечный узел. Направление ветви задаётся от начального узла к конечному, соответственно, значение расхода q_b и скорости u_b на b -й ветви, $b \in U$, может принимать как положительное значение (течение жидкости совпадает с направлением ветви), так и отрицательное. Стоит также отметить, что в общем случае, большинство узлов в сети между собой не связаны: в среднем на каждый узел приходится две–четыре ветви. Следовательно, из всего множества ветвей U_{ib} , где $i \in \mathbb{N}$ необходимо выделить только сравнительно небольшое подмножество существенных ветвей. Такой подход позволяет задать матрицу связей для всего графа в виде (1). Используя это выражение, задачу потокораспределения в сети можно свести к сочетанию закона сохранения массы в узлах (2) и закона сопротивления в каналах (3).

$$E_{ib} = \begin{cases} 1, & \text{если } b \in O_i \\ -1, & \text{если } b \in I_i \\ 0, & \text{иначе,} \end{cases} \quad (1)$$

$$\sum_{b \in U_i} E_{ib} q_b = Q_i, \quad i \in \mathbb{N}, \quad (2)$$

$$s_b |q_b| q_b = \sum_{i \in \mathbb{N}} E_{ib} \cdot p_i \pm P_c, \quad b \in U, \quad (3)$$

где E_{ib} — матрица связи, q_b — объёмный поток жидкости на ветви, Q_i — источник массы, существующий в узле, p_i — давление в i -том узле, P_c — капиллярное давление, знак которого зависит от распределения фаз в канале, s_b — коэффициент сопротивления, определяемый по формуле Дарси — Вейсбаха:

$$s_b = \left(\frac{\lambda_{fr} l}{d} + \xi \right) \frac{\rho}{2f^2}, \quad (4)$$

где λ_{fr} — коэффициент линейного трения, d — гидравлический диаметр канала, l — длина канала, ρ — плотность жидкости, f — площадь сечения канала, ξ — коэффициент местного сопротивления. Коэффициент линейного трения для ламинарного случая определяется следующим образом: $\lambda_{fr} = \frac{C}{Re}$, где C константа зависящая от формы сечения. Стоит отметить, что для задач вытеснения нефти, как правило, характерны очень маленькие скорости течения $< 0,1$ м/с.

Для связи поля давления и расходов используется хорошо зарекомендовавший себя SIMPLE — подобный алгоритм [16].

Плотность и молекулярная вязкость рассматриваемой двухфазной среды находятся через объёмную долю фазы в канале по правилу смеси:

$$\begin{aligned}\rho &= \rho_1(c)\varphi + (1 - \varphi)\rho_2, \\ \mu &= \mu_1(c)\varphi + (1 - \varphi)\mu_2,\end{aligned}\tag{5}$$

где $\rho_1(c)$, $\mu_1(c)$ — плотность и вязкость вытесняющей жидкости, которые зависят от концентрации модифицирующей добавки c , и ρ_2 , μ_2 — плотность и вязкость нефти соответственно.

1.2. Моделирование течения несмешивающихся фаз по сети

Рассмотрим вторую часть математической модели. Если в гидравлической модели сети узел — это материальная точка с заданным давлением и основной рабочий объём сети сосредоточен в ветвях, то для учёта накопления/уноса различных фаз, необходимо каждому узлу придать объём. Для этого сеть разбивается на такие элементы как «поры» — часть сети, где сливаются/разделяются потоки и «каналы» — часть сети, соединяющая две соседних поры. Поры и каналы имеют свой объём. Длина канала меньше длины соответствующей ей ветви, поскольку длина ветви рассчитывается между центрами узлов, а длина канала — от границы до границы узла.

Так как жидкости между собой не смешиваются, то замещение одной жидкости другой сводится в общем случае к уравнению баланса:

$$\varphi_i^{\text{new}} = \varphi_i^{\text{old}} + \frac{\left(\sum q_{\text{in}} - \sum q_{\text{out}}\right)}{V_i} \Delta t,\tag{6}$$

где φ_i^{new} — объёмная доля фазы на новом временном шаге, φ_i^{old} — объёмная доля на предыдущем временном шаге, $\sum q_{\text{in}}$ и $\sum q_{\text{out}}$ — сумма потоков приносящих фазу в элемент и уносящих, соответственно, V_i — объём элемента, Δt — временной шаг, i — номер элемента (как поры так и канала). Временной шаг Δt не является постоянной величиной, а определяется как минимальное время Δt_{min} , необходимое для полного заполнения одной из фаз одного элемента сети. Логично выделить массив элементов, в которых потенциально происходит изменение фазы и работать только с ним, пересчитывая его на каждом временном слое, отслеживая фронт движения фаз в резервуаре. С точки зрения замещения фазы каналы отличаются от пор только тем, что у канала один вход и один выход.

Отдельно стоит рассмотреть ситуацию, когда в «пору» приходят два потока с разными жидкостями. Поскольку невозможно разрешить форму границы раздела фаз, то определить какая фаза выходит из поры также невозможно. Поэтому для соблюдения баланса массы необходимо сделать следующее допущение: если пора не до конца заполнилась вытесняющей жидкостью, то из узла выходит только вытесняемая жидкость. При течении в канале двух несмешивающихся жидкостей в месте раздела фаз из-за межфазного натяжения образуется перепад давления, величина которого для цилиндрического канала определяется из уравнения Юнга — Лапласа:

$$P_c = \frac{2\sigma(c) \cos(\Theta(c))}{d/2},\tag{7}$$

где $\sigma(c)$ — коэффициент поверхностного натяжения, $\Theta(c)$ — контактный угол между твёрдой стенкой и жидкостью, которые зависят от концентрации модифицирующей добавки c , d — гидравлический диаметр.

Рассчитанное в уравнении (7) давление задаётся как напор в уравнении (3). Направление напора задаётся от несмачивающей жидкости в сторону смачивающей. Если граница раздела фаз проходит в пору, то соответствующий напор задаётся на ветви вверх по потоку от соответствующего поре узла. При попадании границы раздела фаз в пору капиллярное давление сохраняется.

1.3. Перенос модифицирующей добавки

Для моделирования процесса переноса модифицирующей свойства вытесняющей жидкости добавки запишем уравнение сохранения массы добавки в дифференциальном виде:

$$\frac{\partial \rho_1 c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_1 u c) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho_1 D \frac{\partial c}{\partial x} \right), \quad (8)$$

где c — массовая концентрация добавки, ρ_1 — плотность, t — время, x — координата вдоль ветви, u — скорость несущего потока жидкости, D — коэффициент диффузии. Важно отметить, что перенос модифицирующей добавки осуществляется только в пределах водной фазы. В общем случае модифицирующие добавки воздействуют на характеристики смачиваемости (контактный угол), величину коэффициента межфазного натяжения и вязкость вытесняющей жидкости (в приближении ньютоновской среды). В качестве модельных растворов в расчётах использовались реальные растворы ПАВ, полимеров и наносuspензий, которые экспериментально были исследованы ранее [17, 18, 19, 20]. Свойства этих растворов (динамическая вязкость (9), коэффициент межфазного натяжения (10) и контактный угол (11) в зависимости от концентрации добавки можно описать следующими выражениями:

$$\mu_1 = \mu_0(1 + \alpha_1 c + \alpha_2 c^2), \quad (9)$$

$$\sigma = \sigma_0(1 + \beta_1 c + \beta_2 c^2), \quad (10)$$

$$\Theta = \Theta_0(1 + \gamma_1 c + \gamma_2 c^2), \quad (11)$$

здесь c — это массовая концентрация, выраженная в процентах.

Аппроксимация соответствующих экспериментальных данных с помощью метода наименьших квадратов позволила определить следующие значения коэффициентов в уравнениях (9)–(11): $\alpha_1 = 659,95$; $\alpha_2 = 2075,97$; $\beta_1 = 19,44$; $\beta_2 = 114,41$; $\gamma_1 = 10,0$ и $\gamma_2 = 38,25$.

Для дискретизации уравнения (8) рассмотрим ветвь графа длиной l и площадью сечения f , на которой необходимо выделить контрольный объём (см. рис. 1).

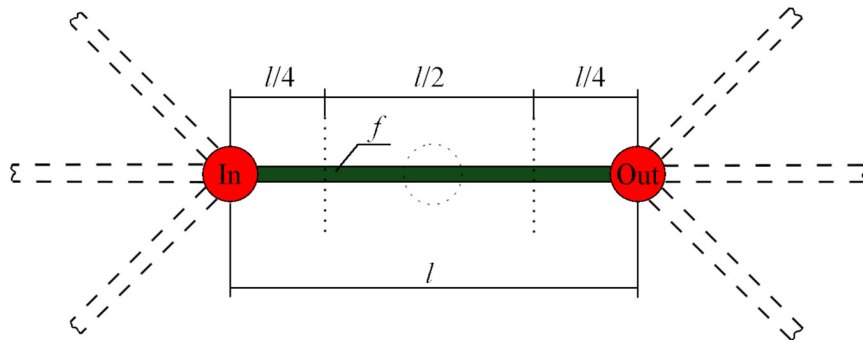


Рис. 1. Выделение контрольных объёмов на ветви

Обычно, при моделировании переноса модифицирующей добавки в сетевой задаче концентрацию добавки рассчитывают в узлах, а затем «сносят» это значение на ветви вниз по потоку. Такой подход справедлив при доминировании конвективного потока над диффузионным. Однако, при использовании неявной схемы для аппроксимации конвективного слагаемого в результате расчёта наблюдается сильная численная диффузия, которая может превышать молекулярную диффузию. В результате фронт концентрации модифицирующей добавки размывается и получается нефизическое решение. Для преодоления этой проблемы был предложен и реализован оригинальный подход учёта динамики распределения модифицирующей добавки по длине ветви, с добавлением фиктивных узлов. Саму ветвь мы можем рассматривать как узел, которому соответствуют две ветви.

Проинтегрировав уравнение (8) по контрольному i -му объёму и представив производные в виде конечных разностей, получим неявную схему первого порядка:

$$\frac{\rho_{1,i}^{k+1} c_i^{k+1} - \rho_{1,i}^k c_i^k}{\Delta t} V_i + \sum_b^{U_{in}} \rho_{1,b}^{k+1} u_b f_b c_b^{k+1} - \sum_b^{U_{out}} \rho_{1,b}^{k+1} u_b f_b c_b^{k+1} = D \sum_j^n \frac{\rho_{1,i}^{k+1} c_i^{k+1} - \rho_{1,j}^{k+1} c_j^{k+1}}{l_j/2} f_j, \quad (12)$$

где k — номер временного шага, V_i — объём i -го контрольного объёма, U_{in} — множество ветвей, по которым конвективный поток поступает в узел, U_{out} — множество ветвей по которым конвективный поток выходит из узла, n — множество соседних контрольных объёмов. На границах расчётной области задаётся условие фиксированного значения концентрации.

Итоговый расчётный алгоритм строится следующим образом:

- 1) задаётся начальное распределение давления, расходов и концентраций фаз по сети;
- 2) определяется список элементов сети, в которых возможен процесс замены фаз на первом временном шаге;
- 3) с помощью уравнения (5) рассчитываются плотность и вязкость для всех элементов сети;
- 4) на ветвях с двумя фазами задаётся напор, соответствующий капиллярному давлению;
- 5) решается гидравлическая задача;
- 6) определяются Δt_{min} ;
- 7) при помощи уравнения (6) пересчитываются доли фаз;
- 8) решается уравнение (12) на перенос модифицирующей добавки;
- 9) пересчитываются свойства жидкости (вязкость, контактный угол и межфазное натяжение);
- 10) обновляется список элементов сети, в которых возможен процесс замены фаз на текущем временном шаге;
- 11) повторяем весь алгоритм с третьего шага.

Выход из алгоритма происходит, когда суммарное время расчёта превышает заданное или не происходит смены фаз ни в одном элементе.

2. ТЕСТИРОВАНИЕ

2.1. Верификация модуля переноса модифицирующей добавки

Проведено тестирование разработанного модуля расчёта переноса модифицирующей добавки в рамках поросетевого подхода. В качестве объекта рассматривается прямой канал, в котором распространяется добавка (не влияющая, в данном случае, на свойства жидкости). Для одномерного случая уравнение (8) с постоянными коэффициентами имеет следующее аналитическое решение: $c(x, t) = \frac{m}{2\rho f \sqrt{\pi D t}} \exp \left\{ -\frac{(x - u \cdot t)^2}{4 D t} \right\}$, где m — масса добавки, ρ — плотность жидкости, f — площадь сечения канала, x — расстояние от центра канала, t — время от начала эксперимента, D — коэффициент диффузии, u — средняя скорость потока на ветви.

Задача решалась в безразмерных переменных. На концах канала концентрация задавалась равной нулю. Канал разбивался на 100 равномерных отрезков. В первом случае рассматривался только диффузионный перенос вещества ($u = 0$). Так как в момент времени $t = 0$ аналитическое решение это δ -функция, которую сложно воспроизвести на расчётной сетке, за начальное было принято распределение в момент времени $t = 1$. На рис. 2(а) представлено сравнение профилей концентраций в момент времени $t = 2$.

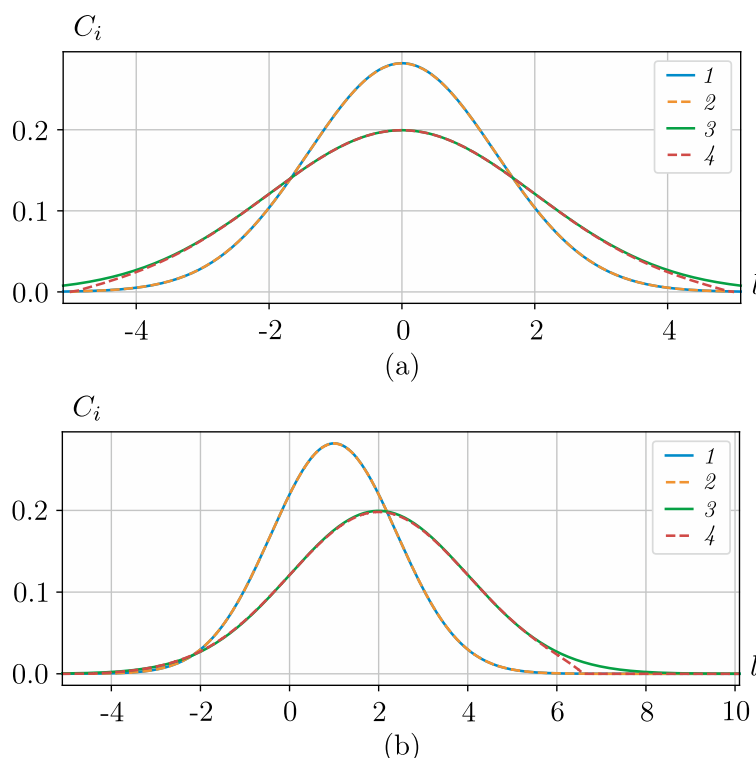


Рис. 2. Распределение концентрации добавки C_i , $i = \overline{1, 4}$, по длине канала в различные моменты времени в сравнении с аналитическим решением для: (а) $u = 0$ и (б) $u = 1$;

- 1 — аналитическое решение в начальный момент времени,
 2 — начальное распределение для расчёта,
 3 — аналитическое решение в момент времени $t = 2$,
 4 — расчётное решение в момент времени $t = 2$

Из рисунка видно хорошее совпадение в центре канала и небольшое отличие на границах. Это связано с тем, что аналитическое решение не согласовано с граничными условиями.

Далее была рассмотрена задача конвективно-диффузионного переноса ($u = 1$). На рис. 2(б) представлено сравнение результатов расчёта с аналитическим решением для этого варианта. В качестве начального распределения также берутся значения для аналитического решения в начальный момент времени. Как видно, также наблюдается достаточно хорошее совпадение результатов расчёта с аналитическим решением. Таким образом, в результате тестирования была показана удовлетворительная разрешающая способность реализованного расчётного алгоритма.

2.2. Моделирование переноса добавки, модифицирующей свойства вытесняющей жидкости, по сетевой модели пористой среды

Для тестирования расчётной методики проведено моделирование вытеснения нефти из регулярной решётки, образованной пересекающимися прямоугольными микроканалами. Эта микрорешётка является простейшей моделью пористой среды. Решётка состоит из 30×30 ячеек (количество микроканалов 31×31). Размер стороны ячейки 250 мкм, ширина и высота микроканалов 250 и 200 мкм соответственно. На первом этапе расчётная область полностью заполнена нефтью, далее происходит её вытеснение чистой водой. На входе в расчётную область (левый нижний угол на рис. 3) задавался расход 3 мл/мин.

Вода заполняла каналы решётки, вытесняя нефть. Контактный угол был задан равным $\Theta_0 = 120^\circ$. Значение коэффициента поверхностного натяжения было задано равным $\sigma_0 = 0,0235$ Н/м. Физические свойства нефти, использованные в расчёте — плотность $\rho_2 =$

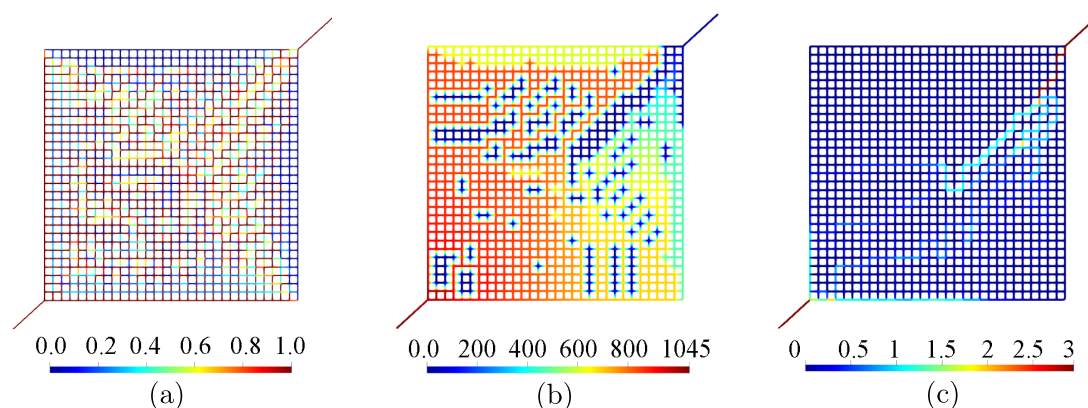


Рис. 3. Расчётные поля распределения физических величин на финальной стадии процесса заводнения водой: (а) объёмная доля воды; (б) поле давления, Па; (с) расход жидкости по микроканалам, мл/мин

850 кг/м³, динамическая вязкость $\mu_2 = 0,02$ Па·с. Вытесняющая жидкость – вода с физическими свойствами: плотность $\rho_1 = 1000$ кг/м³, динамическая вязкость $\mu_0 = 0,001$ Па·с. В процессе расчёта происходит постепенное вытеснение нефти водой. Примерно через 5 секунд после начала процесса заводнения вода доходит до выхода из расчётной области (правый верхний угол). И примерно через 1 секунду после этого процесс течения устанавливается. Вода течёт по одним и тем же каналам. Выход новых порций нефти прекращается. Расчётная картина распределения физических полей на финальной стадии заводнения водой представлена на рис. 3. Из результатов расчёта видно, что значительная часть области после заводнения уже заполнена водой (65%). При этом видно, что вода движется преимущественно в диагональном направлении. Стоит отметить, что большие части расчётной области за счёт действия капиллярных сил остаются заполненными нефтью и не охвачены течением.

После того, как объёмная доля вытесненной нефти стабилизируется (см. рис. 4), на входе в вытесняющую жидкость начинают подавать модифицирующую добавку с концентрацией

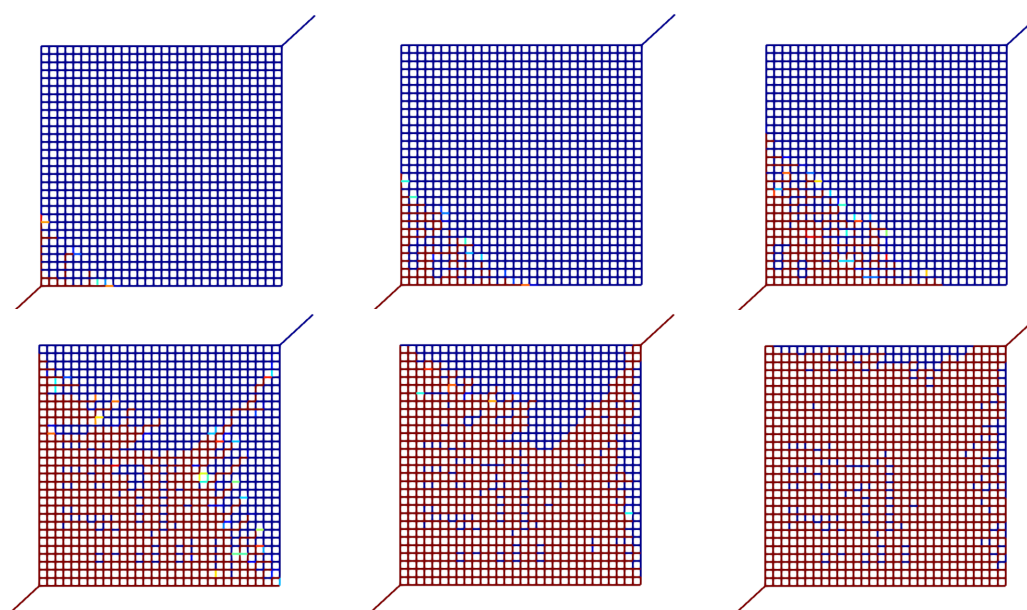


Рис. 4. Динамика движения модифицирующей добавки по сети

$c = 0,1\%$, коэффициент диффузии модифицирующей добавки в воде задавался равным

$D = 10^{-10}$ м²/с. Это происходит примерно после 6 секунд вытеснения водой. Модифицирующая добавка переносится в пределах водной фазы меняя характеристики смачивания и вязкость. На рис. 4 представлена динамика распространения фронта модифицирующей добавки. Видно, что сначала добавка переносится в основном за счёт конвекции по микроканалам, заполненным водой, а затем за счёт диффузии распространяется по всему объёму сети в пределах водной фазы. Поскольку модифицирующая добавка влияет на свойства вытесняющей жидкости, то после того, как добавка дойдёт до границы раздела фаз и её концентрация достигнет своего максимального значения, происходит дополнительное вытеснение нефти за счёт изменения капиллярного давления и увеличения вязкости. На рис. 5(а) представлена динамика изменения водонасыщенности во времени.

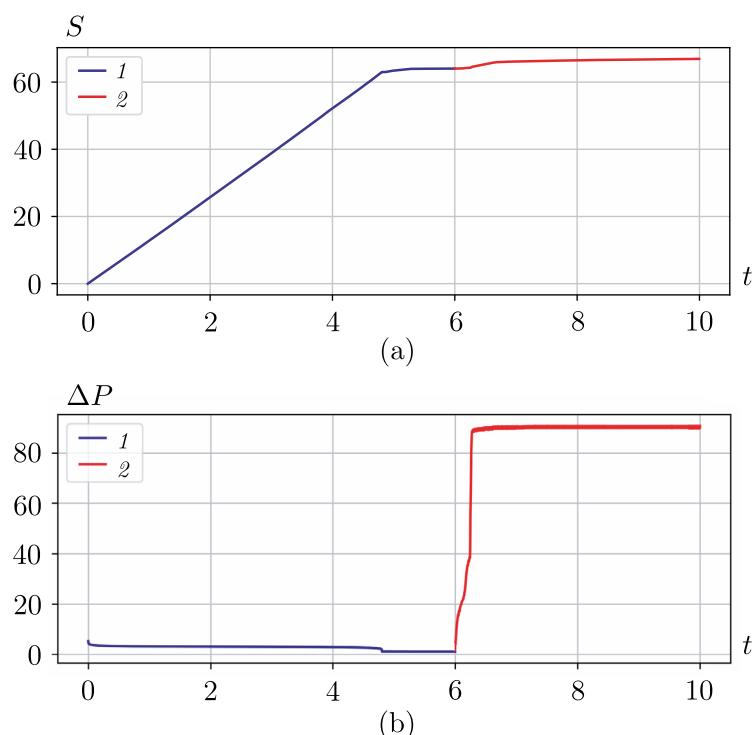


Рис. 5. Динамика изменения: (а) водонасыщенности S , %, и (б) перепада давления ΔP , кПа, до и после подачи модифицирующей добавки; 1 — вода, 2 — вода с модифицирующей добавкой

Здесь до шестой секунды вытеснение производится водой (синяя кривая), а дальше в воду начинает подаваться добавка (красная кривая). Как видно, после того как добавка распространится по водной фазе (на это требуется около 2 с), водонасыщенность дополнительно возрастает до 67%, тем самым происходит довытеснение нефти.

При этом поскольку вязкость вытесняющей жидкости также существенно возросла с 0,001 Па·с до 0,088 Па·с, что приводит к существенному росту перепада давления на прокачку раствора (см. рис. 5(б)).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработана оригинальная математическая модель и реализован программный модуль для поросетевого моделирования переноса модифицирующих добавок (растворы ПАВ и наночастиц) в процессе вторичного заводнения нефтеносных пластов. В рамках двухфазного сетевого подхода выполнено моделирование конвективно-диффузионного механизма переноса модифицирующей добавки в пределах водной фазы с учётом влияния локальной concentra-

ции добавки на коэффициент вязкости, межфазное натяжение и краевой угол смачивания. Серьёзной проблемой, с которой столкнулись при моделировании конвективно-диффузионного переноса добавки в рамках сетевого подхода, явилось существенное влияние численной диффузии. Для преодоления этой проблемы был предложен и реализован оригинальный подход учёта динамики распределения модифицирующей добавки по длине ветви графа с добавлением фиктивного узла. Проведённое тестирование на задаче конвективно-диффузионного модифицирующей добавки (одномерная сеть), имеющей аналитическое решение, показало удовлетворительную разрешающую способность реализованного расчётного алгоритма. Проведена апробация разработанной поросетевой модели переноса модифицирующей добавки в процессе вторичного заводнения регулярной сети, образованной микроканалами.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект 23-79-30022, <https://rscf.ru/project/23-79-30022/>). 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. Cancela B.R. et al. Rheological study of polymeric fluids based on hpm and fillers for application in EOR // Fuel 2022. V. 330. P. 125647.
2. Vik B. et al. Viscous oil recovery by polymer injection; impact of in-situ polymer rheology on water front stabilization// SPE Europec featured at EAGE Conference and Exhibition. SPE, 2018.
3. Sepehri M. et al. Experimental study and numerical modeling for enhancing oil recovery from carbonate reservoirs by nanoparticle flooding // Oil Gas Sci. Technol. – Rev. d'IFP Energies Nouv. 2019. V. 74. P. 5.
4. Wei B. et al. Pore scale simulation of surfactant flooding by lattice boltzmann method // Day 3 Wed, December 12, 2018. SPE, 2018.
5. Zhao J., Wen D. Pore-scale simulation of wettability and interfacial tension effects on flooding process for enhanced oil recovery // RSC Adv. 2017. V. 7, N 66. P. 41391–41398.
6. Minakov A. V. et al. Numerical study of the mechanisms of enhanced oil recovery using nanosuspensions // Theor. Comput. Fluid Dyn. 2021. V. 35, N 4. P. 477–493.
7. Yang Y. et al. Pore-scale simulation of remaining oil distribution in 3D porous media affected by wettability and capillarity based on volume of fluid method // Inter. J. Multiph. Flow. 2021. V. 143. P. 103746.
8. Singh M. Dynamic modeling of drainage through three-dimensional porous materials // Chem. Eng. Sci. 2003. V. 58, N 1. P. 1–18.
9. Regaieg M. et al. Finger thickening during extra-heavy oil waterflooding: simulation and interpretation using pore-scale modelling // PLoS One / ed. Coles J.A. 2017. V. 12, N 1. P. e0169727.
10. Aghaei A., Piri M. Direct pore-to-core up-scaling of displacement processes: Dynamic pore network modeling and experimentation // J. Hydrol. 2015. V. 522. P. 488–509.
11. Gang S. G., Ryou J. E., Jung J. Increase in injection efficiency using surfactant for the geological carbon sequestration // Smart Geotechnics for Smart Societies. CRC Press, 2023. P. 2191–2196.
12. Salmo I.C. et al. Use of dynamic pore network modeling to improve our understanding of experimental observations in viscous oil displacement by polymers // Day 2 Tue, September 01, 2020. SPE, 2020.
13. Li J., McDougall S.R., Sorbie K.S Fragmentation // Rev. Fluid Mech. 2007. V. 39.
14. Filimonov S.A. et al. Development and testing of a mathematical model for dynamic network simulation of the oil displacement process // Fluids. 2022. V. 7, N 9. P. 311.

15. Филимонов С.А. и др. Моделирование сопряжённого теплообмена в системе микроканалов при помощи гибридного алгоритма // Сиб. журн. индустр. математики. 2015. Т. 18 № 3. С. 86–97.
16. Patankar S. Numerical heat transfer and fluid flow // Series in computational methods in mechanics and thermal sciences. 1980.
17. Pryazhnikov M. et al. Microfluidic study of enhanced oil recovery during flooding with polyacrylamide polymer solutions // Micromachines. 2023. V. 14, N 6. P. 1137.
18. Minakov A.V., Rudyak V.Y., Pryazhnikov M.I. Systematic experimental study of the viscosity of nanofluids // Heat Transf. Eng. 2021. V. 42, N 12. P. 1024–1040.
19. Minakov, et al. An experimental study of the effect of the addition of silicon oxide nanoparticles on the wettability characteristics of rocks with respect to oil // Tech. Phys. Letters. 2020. V. 46, N 12. P. 1238–1240.
20. Pryazhnikov M.I. et al. Spontaneous imbibition experiments for enhanced oil recovery with silica nanosols // Capillarity. 2024. V. 10, N 3. P. 73–86.

UDC 532.5

**DEVELOPMENT OF A PORE-NETWORK APPROACH
FOR MODELING THE TRANSFER OF MODIFYING ADDITIVES
IN THE OIL DISPLACEMENT PROCESS**

© 2025 S. A. Filimonov^{1,2a}, A. V. Minakov^{1,2b}

¹*Siberian Federal University,*

Prosp. Svobodny, 79, Krasnoyarsk 660041, Russia,

²*Kutateladze Institute of Thermophysics, SB RAS,*

Prosp. Akad. Lavrentieva, 1, Novosibirsk 630090, Russia

E-mails: ^asfilimonov@sfu-kras.ru, ^baminakov@sfu-kras.ru

Received 10.06.2024, revised 10.07.2025, accepted 17.09.2025

Abstract. The paper presents the results of the development of an original mathematical model and a software module for pore-network modeling of the transfer of modifying additives (solutions of surfactants and nanoparticles) in the process of secondary flooding of oil-bearing formations. Within the framework of the two-phase pore-network approach, modeling of the convective-diffusion mechanism of the transport of the modifying additive within the water phase is implemented, taking into account the influence of the local concentration of the additive on viscosity, interfacial tension and the wetting edge angle. By applying the original approach of adding fictitious nodes to branches, it was possible to significantly reduce the effect of numerical diffusion, which is characteristic of convective diffusion transport models in network problems. As a result of testing on solving a one-dimensional convective-diffusion problem with an analytical solution, the satisfactory resolution of the proposed computational algorithm is shown.

Keywords: pore-network model, transfer and diffusion of a modifying additive, surfactants, reservoir flooding, testing.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2025.28.307

REFERENCES

1. Cancela B.R. et al. Rheological study of polymeric fluids based on HPAM and fillers for application in EOR. *Fuel*, 2022, Vol. 330, pp. 125647.
2. Vik B. et al. Viscous oil recovery by polymer injection; impact of in-situ polymer rheology on water front stabilization. *SPE Europec Featured at EAGE Conference and Exhibition*, SPE, 2018.
3. Sepehri M. et al. Experimental study and numerical modeling for enhancing oil recovery from carbonate reservoirs by nanoparticle flooding. *Oil Gas Sci. Technol. – Rev. d'IFP Energies Nouv*, 2019, Vol. 74, pp. 5.
4. Wei B. et al. Pore scale simulation of surfactant flooding by lattice boltzmann method. Day 3 Wed, December 12, 2018, *SPE*, 2018.
5. Zhao J., Wen D. Pore-scale simulation of wettability and interfacial tension effects on flooding process for enhanced oil recovery. *RSC Adv.*, 2017, Vol. 7, No. 66, pp. 41391–41398.
6. Minakov A. V. et al. Numerical study of the mechanisms of enhanced oil recovery using nanosuspensions. *Theor. Comput. Fluid Dyn.*, 2021, Vol. 35, No. 4, pp. 477–493.

7. Yang Y. et al. Pore-scale simulation of remaining oil distribution in 3D porous media affected by wettability and capillarity based on volume of fluid method. *Inter. J. Multiph. Flow*, 2021, Vol. 143, pp. 103746.
8. Singh M. Dynamic modeling of drainage through three-dimensional porous materials // *Chem. Eng. Sci.* 2003. Vol. 58, No. 1, pp. 1–18.
9. Regaieg M. et al. Finger thickening during extra-heavy oil waterflooding: simulation and interpretation using pore-scale modelling. *PLoS One*, 2017, V. 12, No. 1, pp. e0169727.
10. Aghaei A., Piri M. Direct pore-to-core up-scaling of displacement processes: Dynamic pore network modeling and experimentation. *J. Hydrol.*, 2015, Vol. 522, pp. 488–509.
11. Gang S. G., Ryou J. E., Jung J. Increase in injection efficiency using surfactant for the geological carbon sequestration. *Smart Geotechnics for Smart Societies*, CRC Press, 2023, pp. 2191–2196.
12. Salmo I.C. et al. Use of dynamic pore network modeling to improve our understanding of experimental observations in viscous oil displacement by polymers. Day 2 Tue, September 01, 2020, *SPE*, 2020.
13. Li J., McDougall S.R., Sorbie K.S Fragmentation. *Rev. Fluid Mech.*, 2007, Vol. 39.
14. Filimonov S.A. et al. Development and testing of a mathematical model for dynamic network simulation of the oil displacement process. *Fluids*, 2022, Vol. 7, No. 9, pp. 311.
15. Filimonov, S.A., and others Modelirovanie soprazhzhennogo teploobmena v sisteme mikrokanalov pri pomoshhi gibridnogo algoritma [Modeling of coupled heat transfer in a microchannel system using a hybrid algorithm]. *Sib. Zhurn. Indust. Matematiki*, 2015, Vol. 18, No. 3, pp. 86–97 (in Russian).
16. Patankar S. Numerical heat transfer and fluid flow. *Series in Computational Methods in Mechanics and Thermal Sciences*, 1980.
17. Pryazhnikov M. et al. Microfluidic study of enhanced oil recovery during flooding with polyacrylamide polymer solutions. *Micromachines*, 2023, Vol. 14, No. 6, pp. 1137.
18. Minakov A.V., Rudyak V.Y., Pryazhnikov M.I. Systematic experimental study of the viscosity of nanofluids. *Heat Transf. Eng.*, 2021, Vol. 42, No. 12, pp. 1024–1040.
19. Minakov, et al. An experimental study of the effect of the addition of silicon oxide nanoparticles on the wettability characteristics of rocks with respect to oil. *Tech. Phys. Letters*, 2020, Vol. 46, No. 12, pp. 1238–1240.
20. Pryazhnikov M.I. et al. Spontaneous imbibition experiments for enhanced oil recovery with silica nanosols. *Capillarity*, 2024, Vol. 10, No. 3, pp. 73–86.

СИБИРСКИЙ ЖУРНАЛ
ИНДУСТРИАЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ

2025. Том 28, № 3

Зав. редакцией Т. В. Бугуева

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 15.12.2025 г.
Формат $60 \times 84 \frac{1}{8}$. Усл. печ. л. 13,5.
Объём 7,6 МБ.

Издательство Института математики,
пр. Академика Коптюга, 4, Новосибирск 630090, Россия