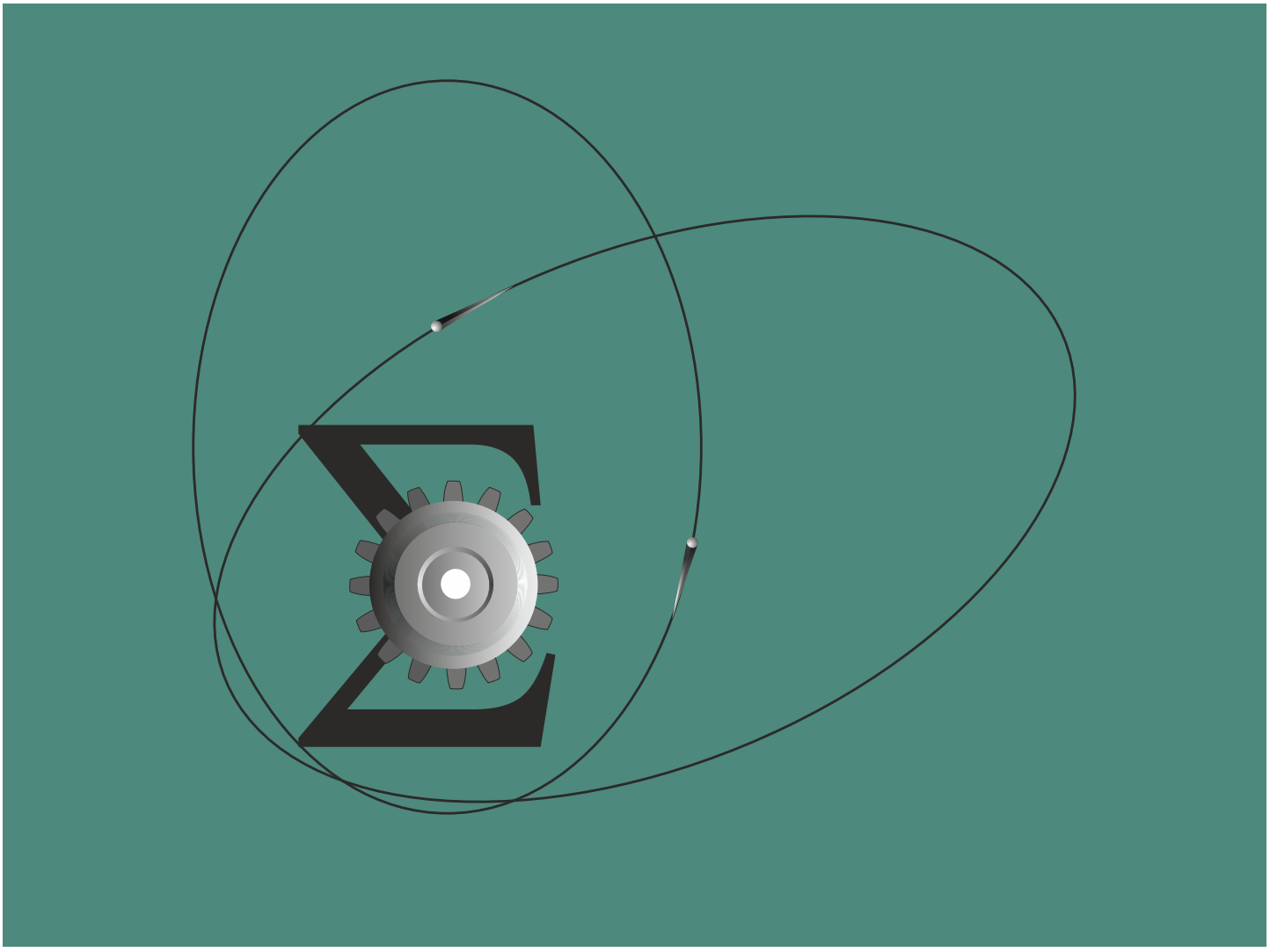
ISSN 2949-6284

СИБИРСКИЙ ЖУРНАЛ ИНДУСТРИАЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ

ТОМ 29 № 3 2026



НОВОСИБИРСК
ИЗДАТЕЛЬСТВО ИНСТИТУТА МАТЕМАТИКИ

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Главный редактор С. И. Кабанихин

Зам. главного редактора В. Л. Береснев
М. А. Шишленин

Отв. секретарь В. А. Дедок

РЕДАКЦИОННЫЙ СОВЕТ

Б. Д. Аннин
М. А. Гузев
В. А. Левин
В. Г. Романов
Е. Е. Тыртышников
В. В. Шайдуров
А. А. Шананин

ЧЛЕНЫ РЕДКОЛЛЕГИИ

Г. В. Алексеев
Ф. А. Алиев
Ж. Бектемесов
В. С. Белоносов
В. Н. Белых
Ю. С. Волков
Г. А. Галкин
В. Н. Глинских
Е. Жанг
В. П. Ильин
А. Н. Карапетянц
М. В. Клибанов
А. И. Кожанов
А. С. Козелков
Т. К. Козубская
О. И. Криворотько
С. Н. Лебедев
Д. В. Лукьяненко
Н. И. Макаренко
И. В. Марчук
С. Б. Медведев
В. С. Михайлов
Р. И. Мулляджанов
Р. Г. Новиков
Д. Е. Пальчунов
А. В. Пененко
И. Б. Петров
М. И. Протасов
Е. М. Рудой
К. К. Сабельфельд
Е. Б. Савенков
В. М. Садовский
И. В. Семенов
Д. Н. Сидоров
С. С. Симаков
А. С. Терсенов
В. А. Титарев
Д. Л. Ткачев

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 29, № 3(107) | Научный журнал | **Июль–сентябрь, 2026 г.**

СОДЕРЖАНИЕ

Абдаллах Н., Бибердорф Э. А. Ускоренный алгоритм построения одномерных спектральных портретов матриц 5

Андреев М. Н., Морев А. Э. Моделирование электромагнитных, тепловых и гидродинамических процессов при левитационной плавке алюминиевых изделий 25

Епифанов А. В. Математическая модель эволюции группирования животных 41

Казаков А.Л., Спевак Л. Ф. Задача об инициировании диффузионной волны для системы реакции-диффузии при смешанных граничных условиях 58

Карчевский А. Л. Решение задачи продолжения позволяет сократить время решения обратной задачи 76

Козелков А. С., Пузан А. Ю., Лаптев И. В., Курулин В. В., Куроедов А. А., Городнов А. О. Валидация пакета программ «Логос» на задачах динамики и теплообмена в двухфазных средах с использованием односкоростной многофазной модели жидкости со свободной поверхностью 94

Мишин А. В. Вывод эффективного коэффициента переноса для гетерогенной среды с иерархической структурой, используя формализм обобщённой производной 116

Почуев А. П., Черный С. Г. Численная трёхмерная модель полного цикла процесса печного производства технического углерода 131

Черный С. Г., Тарраф Д. Оптимизационное проектирование технологии производства технического углерода 160

Шелухин В. В., Неверов В. В. Вихревые структуры при седиментации частиц в наклонном сосуде 189

НОВОСИБИРСК
ИЗДАТЕЛЬСТВО ИНСТИТУТА МАТЕМАТИКИ

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

- теория и численные методы решения уравнений в частных производных механики, физики, химии, биологии, а также технических и природных процессов;
- математическое моделирование в физике, химии, механике, технике, биологии, экологии, экономике, медицине;
- прямые и обратные задачи в естественных науках;
- методы обоснования, регуляризации и применения нейронных сетей для построения математических моделей в науках о Земле и жизни.

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

© Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, 2026

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. 29, No. 3(107) Scientific journal **July–September, 2026**

CONTENTS

Abdallah N., Biberdorf E. A. Accelerated algorithm for constructing one-dimensional spectral portraits of matrices 5

Andreev M N., Morev A. E. Modeling of electromagnetic, thermal, and hydrodynamic processes during levitational heating of aluminum products 25

Epifanov A. V. Mathematical model of the evolution of animal grouping 41

Kazakov A. L., Spevak L. F. The problem to diffusion wave initiation for a reaction-diffusion system under the mixed boundary conditions 58

Karchevsky A. L. Solving the continuation problem allows reducing the time required to solve the inverse problem 76

Kozelkov A. S., Puzan An. Yu., Laptiev I. V., Kurulin V. V., Kuroedov A. A., Gorodnov A. O. Validation of the Logos software package on the problems of dynamics and heat exchange in two-phase media using a single-speed multiphase model of a liquid with a free surface 94

Mishin A. V. Derivation of the effective transport coefficient for heterogeneous media with hierarchical structure using the formalism of generalized derivatives 116

Pochuev A. P., Cherny S. G. Three-dimensional numerical model of the full-cycle furnace process for carbon black production 131

Cherny S. G., Tarraf D. Optimization design of carbon black production technology 160

Kazakov A. L., Spevak L. F. The problem to diffusion wave initiation for a reaction-diffusion system under the mixed boundary conditions 189

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:

- theory and numerical methods for solving partial differential equations in mechanics, physics, chemistry, biology, as well as technical and natural processes;
- mathematical modeling in physics, chemistry, mechanics, engineering, biology, ecology, economics, medicine;
- direct and inverse problems in natural sciences;
- methods of substantiation, regularization and application of neural networks for the construction of mathematical models in the sciences of Earth and life.

EDITORIAL OFFICE ADDRESS:
SibJIM
Sobolev Institute of Mathematics SB RAS
prosp. Akad. Koptyuga 4
Novosibirsk 630090, Russia
E-mail: sibjim-edit@math.nsc.ru

© Sobolev Institute of Mathematics SB RAS, 2026

УДК 519.61

УСКОРЕННЫЙ АЛГОРИТМ ПОСТРОЕНИЯ ОДНОМЕРНЫХ СПЕКТРАЛЬНЫХ ПОРТРЕТОВ МАТРИЦ

© 2026 Н.Абдаллах[1a], Э. А. Бибердорф[2b]

[1] *Новосибирский государственный университет, г. Новосибирск 630090, Россия,*
[2] *Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН, г. Новосибирск 630090, Россия*

E-mails: [a]nouarabdallah111@mail.ru, [b]elina@biberdorf.ru

Поступила в редакцию 29.12.2025 г.; после доработки 21.09.2026 г.; принята к публикации 03.10.2026 г.

Представлен алгоритм, позволяющий ускорить процесс построения одномерных спектральных портретов матриц как графиков норм решения обобщённого дискретного уравнения Ляпунова в зависимости от параметра. Идея нового подхода заключается в частичной замене метода дихотомии спектра относительно окружности на вычисление решений двух классических дискретных уравнений Ляпунова. Эксперименты показали, что применение нового метода позволяет получить значительное ускорение.

Ключевые слова: спектральные портреты, резольвента, матричный спектр, дихотомия спектра, уравнение Ляпунова.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.301

ВВЕДЕНИЕ

Исследование спектров различных операторов требуется при решении многих прикладных задач, например, при анализе устойчивости, сходимости численных методов и т. д. Для этих целей широко используется современное программное обеспечение, включающее в себя реализацию вариаций известных эффективных QR и QZ алгоритмов. Однако, в случае несимметрических задач проблема чувствительности спектра к возмущениям матриц и к вычислительным погрешностям остаётся актуальной. Для демонстрации этого эффекта в работах Годунова С.К. и его соавторов приводится яркий пример с матрицей размера 7×7 (см., например, [1], [2]). А мы возьмём за основу пример матрицы с кратным значением в нуле, приведённый в работе [3], и видоизменим его таким образом, чтобы получить несколько матриц A_j с одинаковым спектром, лежащим в левой полуплоскости и не содержащим кратных собственных значений. Пусть $D_0, \ldots, D_3$ — верхние двухдиагональные матрицы размера 10×10 с одинаковой главной диагональю:

$$[-1, -1.1, -1.2, \ldots, -1.9].$$

Вторые диагонали выберем следующими: $[2, 2, \ldots, 2]$ для D_0, $[10, 10, \ldots, 10]$ для D_1, $[50, 50, \ldots, 50]$ для D_2, $[3^8, 3^6, 3^3, 3^2, 3^2, 3, 3, 3^{-1}, 3^{-1}]$ для D_3. L_1, L_2 — нижние двухдиагональные матрицы, на главной диагонали у которых стоят единицы, а на второй диагонали: -1 у матрицы L_1 и -2 у L_2. Рассмотрим матрицы A_j, связанные с матрицами $D_0, \ldots, D_3$ подобным преобразованием

$$\begin{aligned} &A_0 = L_1 D_0 L_1^{-1}, \quad A_1 = L_1 D_1 L_1^{-1}, \quad A_2 = L_1 D_2 L_1^{-1}, \\ &A_3 = L_2 D_1 L_2^{-1}, \quad A_4 = L_2 D_2 L_2^{-1}, \quad A_5 = L_1 D_3 L_1^{-1}. \end{aligned} \tag{1}$$

Вычислим спектр матриц A_j с помощью процедуры eig в Matlab. Результаты изображены на рис. 1. Звёздочками и кружками отмечены значения, вычисленные на разных компьютерах. Как видно, на точность вычислений влияет как несимметричность исходных матриц D_k, так и число обусловленности матриц L_k. При этом вычисленные собственные значения могут создавать различные конфигурации: как симметричные так и несимметричные относительно среднего арифметического точных собственных значений.

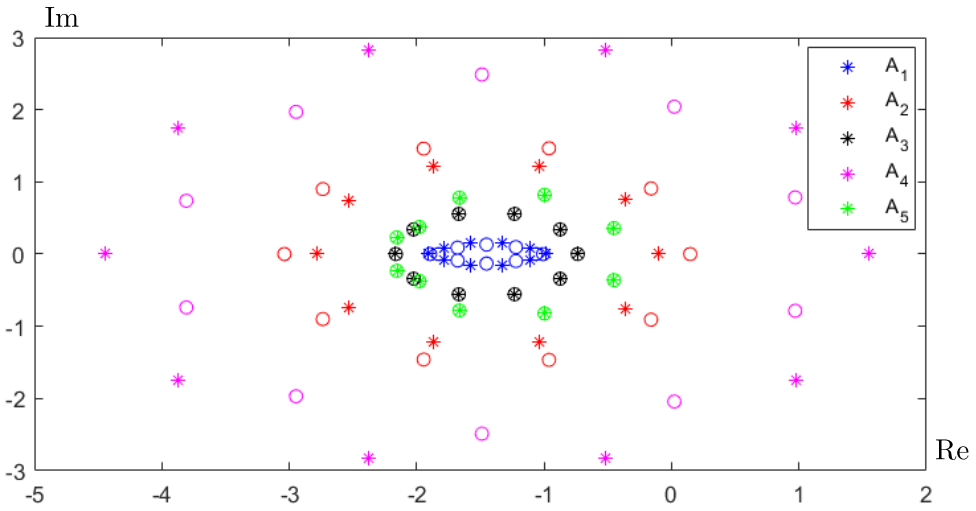


Рис. 1. Вычисленные собственные значения матриц A_j

Очевидно, что такой уровень погрешности может быть неприемлем во многих прикладных задачах. При этом программа никак не характеризует точность результата, а у пользователя, не являющегося квалифицированным специалистом в вычислительных методах линейной алгебры, нет инструмента для его проверки.

В то же время простым и наглядным способом визуализации чувствительности собственных значений являются спектральные портреты [1], [2], [4], [5]. Обычный спектральный портрет представляет собой поверхность над комплексной плоскостью параметра λ, задаваемую функцией $\|(A-\lambda I)^{-1}\|$ или $\sigma_{\min}(A-\lambda I)$. Здесь использованы следующие обозначения A — заданная матрица, I — единичная матрица того же размера, $\sigma_{\min}$ — минимальное сингулярное число, $\|\cdot\|$ – спектральная норма.

Для определения одномерных спектральных портретов используется следующий подход.

Если $\gamma(a)$ — параметризованное семейство кривых, тогда одномерный спектральный портрет — это график функции $\|H_A(a)\|$:

$$H_A(a) = \frac{1}{l_{\gamma(a)}} \int\limits_{\gamma(a)} (A^* - \overline{\lambda} I)^{-1} C_0 (A-\lambda I)^{-1}\, d\lambda. \tag{2}$$

Здесь параметр $l_{\gamma(a)}$ равен длине кривой $\gamma(a)$, если кривая замкнута, и фиксированной ненулевой константе, если длина $\gamma(a)$ бесконечна, например в случаях, если $\{\gamma(a)\}$ представляет собой семейство прямых, парабол или гипербол. Отметим, что в случае окружностей и прямых матрица $H_A(a)$ является решением одного из двух обобщённых уравнений Ляпунова (см., например, [1], [2]). В случае параболы в работе [6] сконструирован аналог обобщённого уравнения Ляпунова. Вероятно, подобные матричные уравнения, для которых $H_A(a)$ является решением, можно построить и для других кривых. Более подробно свойства спектральных портретов обсудим в следующем разделе.

Заметим, что $\|H_A(a)\| = \infty$ если $\lambda_j(A)$ лежит на $\gamma(a)$, то есть матрица $H_A(a)$ и её норма $\|H_A(a)\|$ являются матричным и численным критериями разделения на две части (дихото-

мии) спектра матрицы A относительно кривой $\gamma(a)$ (см., например, [1], [2], [5]–[14]). Отметим, что постановка задачи дихотомии и методы её решения являются естественным и ближайшим обобщением задачи о линейной устойчивости по Ляпунову. Для вычисления матричных критериев дихотомии на данный момент создана целая группа итерационных алгоритмов. Основным можно назвать алгоритм дихотомии спектра относительно окружности [7]–[10], и именно о нём пойдёт речь в последующих разделах. Дихотомия спектра относительно других кривых сводится к задаче дихотомии окружностью. По этому принципу, например, построены алгоритмы разделения спектра относительно кривых второго порядка [11, 12]. Для приложений, связанных с задачами устойчивости, наибольшее значение имеет задача дихотомии спектра относительно прямой. Первые алгоритмы из этой группы (см. [1, 2], [9, 10], [13]) основывались на экспоненциальном преобразовании для отображения мнимой оси в единичную окружность, что является с одной стороны довольно естественным приёмом, но с другой — накладывало жёсткие ограничения на матрицу. Использование для тех же целей дробно-линейного преобразования позволило расширить область применения метода дихотомии. На основе дробно-линейных преобразований спектральной переменной построены также алгоритмы, определяющие отсутствие спектра матрицы на отрезке и луче, создан алгоритм дихотомии корней полинома относительно мнимой оси, последовательное выполнение нескольких алгоритмов дихотомии позволяет разделять спектр относительно кусочно-гладких кривых, состоящих из отрезков и дуг [14].

Вычислительная устойчивость этих алгоритмов обусловлена тем, что основой каждой итерации является QR-разложение определённой матрицы, реализация которого, однако, связана с относительно высокими вычислительными затратами. Самым быстрым из алгоритмов дихотомии окружностью считается алгоритм Малышева А. Н., представленный в работах [9, 10], который мы более подробно рассмотрим в разд. 2.

Следует отдельно заметить, что отличительной чертой методов дихотомии является одновременное разделение спектра на две части (вычисление проекторов на инвариантные подпространства, приведение матрицы к клеточно-диагональной форме) и диагностика качества этого разделения с помощью критерия дихотомии. Таким образом, любой пользователь, получив результат вычислений, понимает, в какой степени данному результату можно доверять.

Структура работы следующая. Раздел 1 посвящён обсуждению свойств псевдоспектров и спектральных портретов. В разд. 2 рассматриваются алгоритм Малышева и его модификация, содержащая определённые усовершенствования, направленные на повышение эффективности. Проводится их сравнение с другими методами. В разд. 3 предлагается комбинированный итерационный метод для нахождения решения обобщённого дискретного уравнения Ляпунова, зависящего от параметра r. Работа нового алгоритма тестируется в численных экспериментах и сравнивается с алгоритмом Малышева по точности и скорости. Каждый пример снабжён нами ссылкой на программный код, с помощью которого проведены расчёты. Это даёт возможность читателю повторить представленные вычислительные эксперименты, провести эксперимент с другими параметрами или использовать программные реализации алгоритмов в своей работе.

1. СПЕКТРАЛЬНЫЕ ПОРТРЕТЫ

Двумерные спектральные портреты можно изобразить либо в виде поверхности $\|(A-\lambda I)^{-1}\|$ над комплексной плоскостью, либо в виде контуров

$$\sigma_{\min}(A-\lambda I)=\varepsilon \tag{3}$$

для фиксированных $\varepsilon>0$. Области внутри контуров называются ε-спектром или псевдоспектром и являются обобщением понятия спектра. Каждая точка принадлежащая ε-спектру является собственным значением некоторой возмущённой матрицы $\tilde{A}$ такой, что $\|\tilde{A}-A\|\leqslant\varepsilon$.

Для удобства анализа предпочтительно изображать графики логарифма: $\log_{10}\|(A-\lambda I)^{-1}\|$. На рис. 2 приведены спектральные портреты матриц A_1, A_2 (см. (1)). Видно, что пятна псевдоспектра матрицы A_2 значительно больше, чем у A_1, что объясняет разницу в погрешности собственных значений при вычислениях.

Текст программы, использованной для вычисления графиков на рис. 2, находится по ссылке https://github.com/nouar1-23/Two-dimensional-spectral-portraits

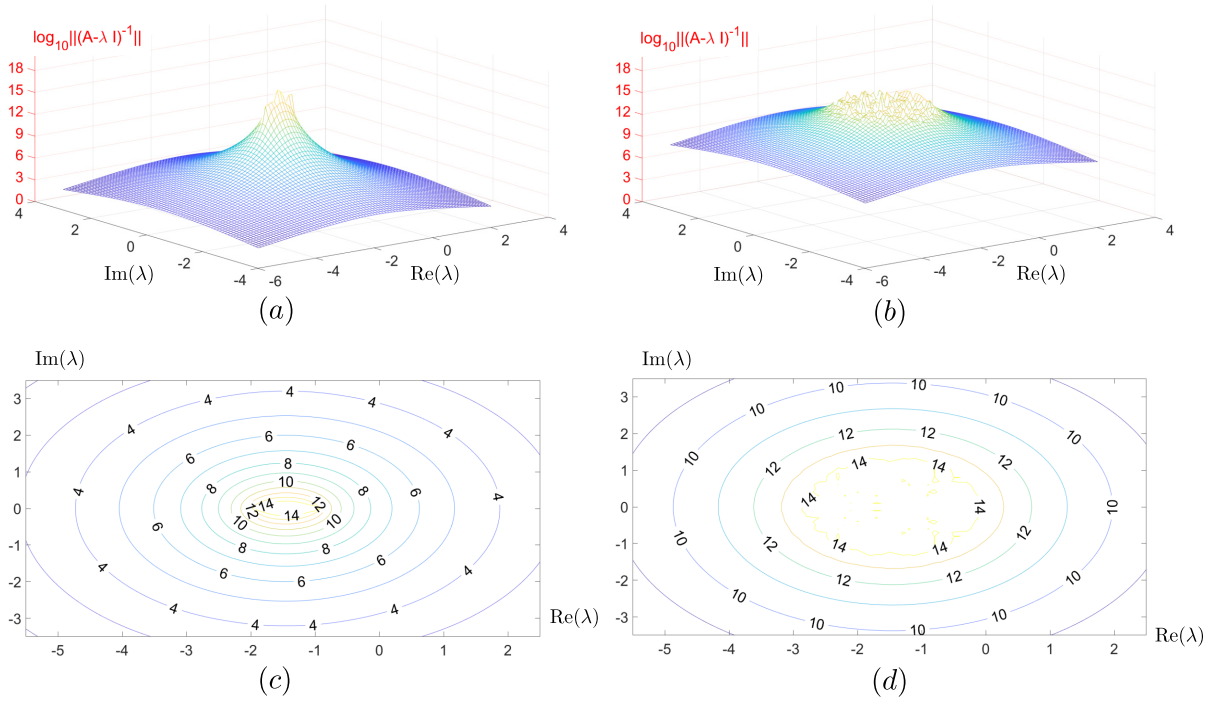


Рис. 2. Псевдоспектр матриц: (a) A_1, (b) A_2;
(c), (d) — линии уровня функции (3) для $\varepsilon = 10^k$,
соответствующие значения k обозначены на графиках

Перейдём к обсуждению одномерных спектральных портретов. Нас в первую очередь интересуют радиальные спектральные портреты, когда семейство кривых представляет собой окружности с центром в нуле. Во-первых, как уже говорилось, те значения параметра r, при которых график функции $\|H_A(r)\|$ выходит на вертикальную асимптотику (стремится к бесконечности), являются радиусами окружностей, на которых расположены собственные значения.

Во-вторых, если значение $\|H_A(r)\|$ конечно, а значит собственные значения на окружности радиуса r отсутствуют, можно оценить внутренний ρ_{in} и внешний ρ_{out} радиусы кольца, внутри которого также нет собственных значений (см. [14]):

$$\rho_{\text{in}} = r\sqrt{\frac{\|H_A(r)\|-1}{\|H_A(r)\|+1}}, \qquad \rho_{\text{out}} = r\sqrt{\frac{\|H_A(r)\|+1}{\|H_A(r)\|-1}}.$$

В-третьих, когда $\|H_A(r)\| < \infty$, можно оценить $\|H_B(r)\|$, если матрицы A, B достаточно близки.

Теорема 1.1. *Пусть матрицы A, B близки в смысле неравенства $\|A-B\| \leqslant \varepsilon\|A\|$, где $\varepsilon > 0$. Тогда при условии*

$$\varepsilon m_\gamma(A) < 1, \ \text{где } m_\gamma(A) = \|A\| \max_{\lambda\in\gamma} \|(A-\lambda I)^{-1}\|, \tag{4}$$

их матричные критерии дихотомии H_A, H_B относительно кривой γ, определённые по формуле (2)*, подчиняются оценке*

$$\|H_A - H_B\| \leqslant \frac{\varepsilon m_\gamma(A)}{1-\varepsilon m_\gamma(A)}\left(2+\frac{\varepsilon m_\gamma(A)}{1-\varepsilon m_\gamma(A)}\right)\|H_A\|.$$

Подобная теорема сформулирована в [1] в виде задачи и доказывается с использованием следующего представления резольвент

$$(B-\lambda I)^{-1} = (I+\Delta(\lambda))(A-\lambda I)^{-1}, \quad \|\Delta(\lambda)\| \leqslant \frac{\varepsilon m_\gamma(A)}{1-\varepsilon m_\gamma(A)}.$$

Следствие 1.1. *Пусть у матрицы A нет точек спектра на кривой γ, т. е. $\|H_A\| < \infty$. Тогда для того, чтобы у матрицы B также отсутствовал спектр на γ, $\|H_B\|<\infty$, достаточно выполнения неравенства*

$$\|A-B\| \leqslant \delta_\gamma, \ \text{ где } \ \delta_\gamma = \frac{l_\gamma}{4}\left(\sqrt{1+\frac{16}{\|H_A\|l_\gamma^2}}-1\right). \tag{5}$$

Доказательство. Из условия теоремы 1 следует, что для одновременной ограниченности критерия дихотомии для матриц A и B достаточно, чтобы удовлетворялось неравенство (4). Однако, согласно теореме 4.2 из [1] имеет место соотношение

$$m_\gamma(A) \leqslant \|A\|\|H_A\|\frac{l_\gamma}{4}\left(1+\sqrt{1+\frac{16}{\|H_A\|l_\gamma^2}}\right).$$

Значит, при выборе $\delta_\gamma = \varepsilon\|A\|$ такого, что

$$\delta_\gamma = \left[\|H_A\|\frac{l_\gamma}{4}\left(1+\sqrt{1+\frac{16}{\|H_A\|l_\gamma^2}}\right)\right]^{-1},$$

неравенство (4) выполняется. Если при этом избавиться от корня в знаменателе, то будет получено нужное представление δ_γ (5). □

Если ввести дополнительное условие на $\|H_A\|$, оценку (5) можно упростить, несколько загрубив.

Следствие 1.2. *Пусть у матрицы A нет точек спектра на кривой γ, т. е. $\|H_A\| < \infty$, причём $\|H_A\| > 16/l_\gamma$. Тогда для того, чтобы у матрицы B также отсутствовал спектр на γ, $\|H_B\|<\infty$, достаточно выполнения неравенства*

$$\|A-B\| \leqslant \delta_\gamma, \quad \text{где} \quad \delta_\gamma = \frac{2}{\|H_A\|}\left(1-\frac{4}{\|H_A\|l_\gamma}\right). \tag{6}$$

Доказательство. Заметим, что при $0 < x < 1$ из разложения в ряд Тейлора следует, что $\sqrt{1+x} > 1 + x/2 - x^2/8$. Применяя это выражение к правой части представления (5) для δ_γ, получаем оценку (6), достаточную для выполнения (4). □

Таким образом, размер окрестности матрицы A в пространстве матриц, в которой каждая матрица не имеет собственных значений на γ, обратно пропорционален критерию дихотомии $\|H_A\|$.

На рис. 3 представлены радиальные спектральные портреты матриц A_0, A_1 и A_3. «Пики» на графике для A_0 указывают на модули собственных значений. Но на графиках для A_1

и A_3 невозможно выделить отдельные «пики». Вместо этого на целом интервале параметра r критерий дихотомии принимает весьма большие значения, которые при этом ведут себя хаотично, как следствие вычислительных погрешностей. Такие интервалы r указывают на наличие пятен ε-спектра для достаточно малого ε, охватывающие все собственные значения.

Также на рис. 3 представлены графики зависимости $\log_{10}\delta(r)$, где величина $\delta(r) = \delta_{\gamma(r)}$ определена формулой (5) для окружности с радиусом r. Точки пересечения этих графиков с прямой $\log_{10}\delta = -15$ разделяют весь рассматриваемый интервал на области, в которых $\log_{10}\delta(r) > -15$ либо < -15. В первых областях находятся значения r радиусов окружностей, на которых нет собственных значений как у исходной матрицы A_j так и у всех её возмущений B_j, если $\|A_j - B_j\| \leqslant 10^{-15}$. И наоборот, если r принадлежит области второго типа, где график $\log_{10}\delta(r)$ опускается ниже уровня -15, то может найтись такое возмущение B_j, $\|A_j - B_j\| \leqslant 10^{-15}$, у которого точки спектра лежат на окружности радиуса r, то есть эти области играют роль спектральных пятен.

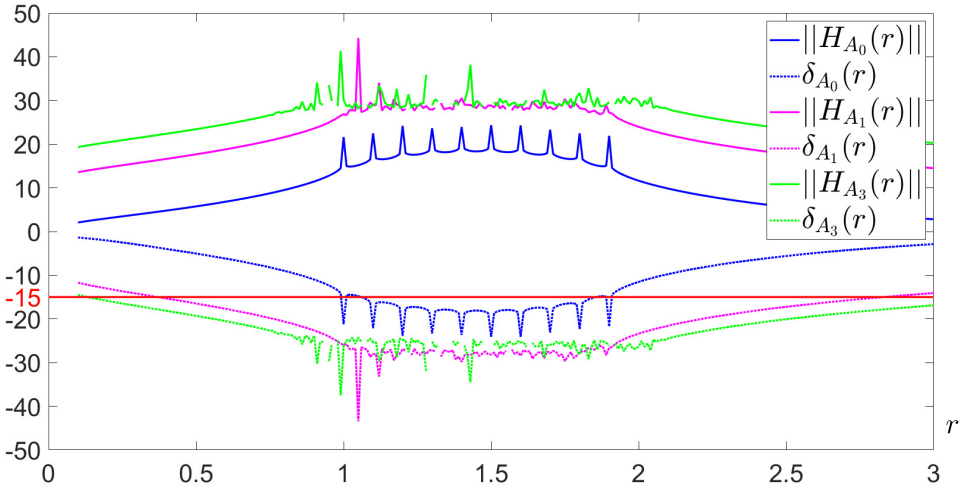


Рис. 3. Одномерные спектральные портреты матриц A_0, A_1 и A_3

Графики построены с помощью программы, текст которой доступен по ссылке https://github.com/nouar1-23/One-dimensional-spectral-portraits

Как видно из примеров, спектральные портреты являются достаточно информативным инструментом. В работах академика Годунова С. К. и его соавторов спектральные портреты применялись для исследования проблемы флаттера крыла, колебаний лопастей турбины, явления резонанса [2, 5]. В последние годы эти методы нашли применение в области, связанной с определением распределений нейтронов в твэлах [15]. Несмотря на это спектральными портретами пользуются редко. Одна из возможных причин — это сравнительно большие временные затраты. В данной же работе представлен подход, позволяющий ускорить процесс построения одномерных спектральных портретов. Ускорение достигается за счёт комбинации двух методов решения уравнения Ляпунова.

2. АЛГОРИТМ ДИХОТОМИИ МАЛЫШЕВА И ЕГО СВОЙСТВА

2.1. Модификации метода Малышева

В качестве семейства кривых мы будем рассматривать окружности $\gamma(r)$ радиуса r с центром в нуле. В этом случае критерий дихотомии $H = H_A(r)$ представляет собой решение следующего обобщённого уравнения Ляпунова

$$H - \frac{1}{r^2}A^*HA = P^*C_0P - (I-P)^*C_0(I-P), \tag{7}$$

где P, $I-P$ — матрицы проекторов на инвариантные подпространства матрицы A, отвечающие собственным числам, лежащим соответственно внутри и вне окружности радиуса r, $C_0 = C_0^* > 0$ — постоянная матрица. Далее для простоты изложения мы полагаем $C_0 = I$.

Разрешимость уравнения (7), дополненного условиями на проекторы и матрицу H

$$P^2 = P, \quad PA = AP, \quad H^* = H > 0, \quad P^*H = HP, \tag{8}$$

устанавливается следующей теоремой [1]

Теорема 2.1 (Обобщённая теорема Ляпунова). *Система* (7), (8) *для любого* $r > 0$ *такого, что* $|\lambda_j(A)| \neq r$, *разрешима единственным образом, причём решение* $H = H^*$ *имеет интегральное представление*

$$H = H(r) = \frac{1}{2\pi} \int\limits_{\gamma(r)} (A^* - \overline{\lambda} I)^{-1} (A - \lambda I)^{-1} \, d\lambda.$$

Очевидно, что смысл теоремы и свойства матрицы H не меняется при замене A на A^*.

Задача дихотомии матричного спектра относительно окружности радиуса r подразумевает нахождение решения системы (7), (8). Все существующие варианты алгоритмов дихотомии окружностью (см. [1], [7], [10], [13] и др.) основаны на решении системы матричных разностных уравнений с постоянными коэффициентами методом ортогональных исключений. Вследствие чего все алгоритмы этого семейства имеют итерационную структуру, причём на каждой итерации выполняется операция QR-разложения для перехода от матричного пучка $A_k - \lambda B_k$ к следующему пучку $A_{k+1} - \lambda B_{k+1}$:

$$\begin{bmatrix} -B_k & A_k & 0 \\ A_k & 0 & -B_k \end{bmatrix} = Q \begin{bmatrix} \times & \times & \times \\ 0 & A_{k+1} & -B_{k+1} \end{bmatrix}. \tag{9}$$

Очевидно, что переход (9) может быть осуществлён более экономично. Для этого QR-разложение применяется к матрице

$$\begin{bmatrix} -B_k \\ A_k \end{bmatrix} = \begin{pmatrix} \times & Q_1 \\ \times & Q_2 \end{pmatrix} \begin{bmatrix} \times \\ 0 \end{bmatrix},$$

а новые матрицы имеют вид $A_{k+1} := Q_1^* A_k$, $B_{k+1} := Q_2^* B_k$.

Алгоритм, созданный Малышевым А. Н., является самым быстрым среди алгоритмов дихотомии окружностью. Его преимущество в скорости выполнения связано с тем, что его итерации не предусматривают обязательного обращения каких-либо матриц. Малышев А. Н. предлагал заранее оценивать число необходимых итераций по формуле (см. [10]):

$$m_0 = \log_2 \left[(1 + \omega_{\max}) \ln \frac{2(1+\varepsilon)\sqrt{\omega_{\max}}}{\varepsilon} \right], \tag{10}$$

где ε — желаемая абсолютная точность вычисления проекторов P, $I-P$, а $\omega_{\max}$ — максимально допустимая норма решения $\|H\|$. Превышение этой границы означает, что спектр матрицы A подходит слишком близко к окружности и не может быть разделён достаточно надёжно. И только после выполнения m_0 итераций вычисляются проекторы, для чего и производится однократное обращение матрицы $P \approx -(A_k - B_k)^{-1} B_k$.

Такой подход возможен вследствие двух факторов. Во-первых, алгоритм Малышева предназначен для решения задачи

$$\hat{H} - \frac{1}{r^2} A \hat{H} A^* = PP^* - (I-P)(I-P)^*,$$

эквивалентной (7). Во-вторых, в алгоритме перед основной итерационной процедурой производится предварительная балансировка исходного матричного пучка $A - \lambda I$. Откуда следует существование предела $H = \lim_{k\to\infty}(B_k + A_k)^{-1}(B_k + A_k)^{-*}$, а значит вычисление H также можно провести однократно после завершения итерационного цикла. То есть алгоритм Малышева не требует обращения матриц на каждом шаге, и именно это делает его более быстрым по сравнению с другими методами.

Алгоритм 1 (Малышев А.Н., оригинал).

Дано: матрица A, r — радиус окружности, ε — критерий сходимости, $\omega_{\max}$ — максимально допустимая норма решения, I — единичная матрица, m_0 — заданное число итераций, вычисленное по формуле (10).

Шаг 1. Балансировка пучка:

$$[Q, R] := \mathrm{qr}\begin{bmatrix} A^*/r \\ I \end{bmatrix}, \quad Q = \begin{bmatrix} A_0 & \times \\ B_0 & \times \end{bmatrix}.$$

Шаг 2. **for** $i = 1 : m_0$

$$[Q, R] = \mathrm{qr}\begin{bmatrix} -B_0 \\ A_0 \end{bmatrix}, \quad Q = \begin{pmatrix} \times & Q_1 \\ \times & Q_2 \end{pmatrix},$$
$$A_1 := Q_1^* A_0, \quad B_1 := Q_2^* B_0,$$
$$A_0 := A_1, \quad B_0 := B_1$$

end for.

Шаг 3. **if** $\max(\mathrm{cond}(A_1 - B_1), \mathrm{cond}(A_1 + B_1)) > \omega_{\max}$
print('дихотомия невозможна')
return
end if

$P = -(A_1 - B_1)^{-1}B_1$ % Проектор
$H = (B_1 + A_1)^{-1}(B_1 + A_1)^{-*}$ % Решение обобщённого уравнения Ляпунова

Результат P, H.

Заметим, что оценка достаточного числа итераций (10), которая используется в алгоритме, как правило даёт слишком завышенные значения, так как при её получении учитывается максимально допустимая $\|H\|$. В результате несмотря на то, что при выполнении алгоритма не тратится время на обращения матриц, избыточное количество итераций значительно увеличивает время работы программы. Если включить в алгоритм периодическую проверку сходимости, то его работа ускорится. Проверку сходимости можно организовать различным образом: можно контролировать норму разности двух последовательно вычисленных матриц H и/или P либо невязку $P^2 - P$. При этом для контроля сходимости проекторов предпочтительно использовать абсолютную оценку, так как норма проектора может быть нулевой, а для матриц H лучшим вариантом является относительная оценка. Три возможных варианта приведены ниже. Так как проверка сходимости требует вычисления H или P, а значит и обращения матрицы, то её следует проводить не на каждой итерации. Так в алгоритме ниже такая проверка производится через три итерации. Кроме того, для ускорения вместо спектральной нормы $\|\cdot\|$ для проверки сходимости можно использовать эквивалентную норму $\|\cdot\|_{\max}$, которая вычисляется проще и быстрее: $\|A\|_{\max} = \max_{kl}|A_{kl}|$.

В результате этих изменений получается вариант алгоритма, который работает быстрее, чем оригинал.

Алгоритм 2 (Малышев А.Н., модификация).

Дано: матрица A, r – радиус окружности, ε – критерий сходимости, $\omega_{\max}$ — максимально допустимая норма решения, I — единичная матрица, m_0 — заданное число итераций.
$P_0 := 2I$ % Начальное приближение проектора для 1-го или 2-го условий.
$\%H_0 := I$ % Начальное приближение решения для 3-его условия.
$\%k := 0$ % Число итераций.

Шаг 1. Балансировка пучка

$$[Q, R] := \mathrm{qr}\begin{bmatrix} A^*/r \\ I \end{bmatrix}, \quad Q = \begin{bmatrix} A_0 & \times \\ B_0 & \times \end{bmatrix}$$

Шаг 2. Первая итерация
$P_1 := -(A_0 - B_0)^{-1}B_0\%$ для 1-го или 2-го условий
$\%\ H_1 := (B_0 + A_0)^{-1}(B_0 + A_0)^{-*}\%$ для 1-го или 2-го условий

Шаг 3. while $\|P_1 - P_0\|_{\max} > \varepsilon$ **and** $k \leqslant m_0$ % 1-ый вариант условия
$\%\ \|P_1^2 - P_1\|_{\max} > \varepsilon$ **and** $k \leqslant m_0$ % 2-ой вариант условия
$\%\ \|H_1 - H_0\|_{\max} > \varepsilon\|H_1\|_{\max}$ **and** $\|H_1\|_{\max} < \omega_{\max}$ **and** $k \leqslant m_0$,% 3-ий вариант условия
for $i = 1 : 3$

$$[Q, R] = \mathrm{qr}\begin{bmatrix} -B_0 \\ A_0 \end{bmatrix}, \qquad Q = \begin{pmatrix} \times & Q_1 \\ \times & Q_2 \end{pmatrix},$$

$$A_1 := Q_1^* A_0, B_1 := Q_2^* B_0,$$

$$A_0 := A_1, B_0 := B_1,$$

end for
if $\max(\mathrm{cond}(A_1 - B_1), \mathrm{cond}(A_1 + B_1)) > \omega_{\max}$
print('дихотомия невозможна')
return
end if
$k := k + 3$
$P_0 := P_1$ $\%H_0 := H_1$
$P_1 := -(A_1 - B_1)^{-1}B_1$ $\%H := (B_1 + A_1)^{-1}(B_1 + A_1)^{-*}$
end while
$H = (B_1 + A_1)^{-1}(B_1 + A_1)^{-*}$ % 1-ый и 2-ой варианты
$\%P := -(A_1 - B_1)^{-1}B_1$ % 3-ий вариант
Результат P, H.

Программная реализация данного алгоритма находится по следующей ссылке: https://github.com/nouar1-23/malysheva-method-1d-spectral-portraits

Сравним на численных примерах скорость работы Алгоритмов 1 и 2. С этой целью для матриц различной размерности n, элементы которых являются равномерно распределёнными на интервале $[0, 1]$ случайными числами, выполним построение одномерного спектрального портрета на отрезке $[1, 2]$. Это значит, что для $r_j \in [1, 2]$, $r_j = 1 + j \cdot 0.01$, $j = 0, 1, 2, \ldots, 100$ происходит вычисление матрицы H с помощью оригинального и модифицированного алгоритмов, причём с использованием 1-го или 2-го варианта условия сходимости. Для каждой размерности n построение происходит 15 раз, затем время выполнения программы усредняется. В алгоритмах используются следующие константы: $\varepsilon = 10^{-10}$, $\omega_{\max} = 10^{16}$. На рис. 4 изображены графики времени построения спектрального портрета в зависимости от n. Видно,

что оригинальный Алгоритм 1, даже с оптимизированным QR-разложением заметно проигрывает алгоритмам с контролем сходимости. Наилучший результат показывает Алгоритм 2 со вторым вариантом условия сходимости, поэтому именно этот алгоритм в дальнейшем будем использовать для сравнения с новым методом.

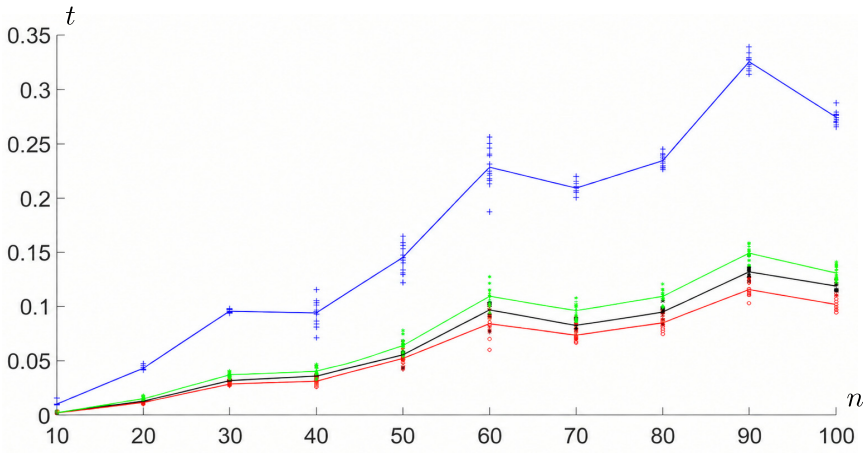


Рис. 4. Время, затраченное на построение спектрального портрета с помощью различных вариантов алгоритма Малышева А. Н.: синяя линия — Алгоритм 1, чёрная, красная и зелёная линии — Алгоритм 2 с использованием первого, второго и третьего варианта условий сходимости соответственно

Для построения графиков (рис. 4) использовалась программа, текст которой размещён по следующей ссылке: https://github.com/nouar1-23/malysheva-performance-comparison

2.2. Сравнение с другими методами

Альтернативный подход к решению задачи (8), основанный на разложении Шура, представлен в работе [16]. По имени авторов будем называть его методом Садкане — Сиджи. Метод состоит из следующих этапов: сначала вычисляется разложение Шура матрицы. Затем путём решения уравнения Сильвестра находится проектор. Обобщённое уравнение Ляпунова разбивается на два отдельных дискретных уравнения Ляпунова. На последнем этапе из их решений восстанавливается искомое решение обобщённого уравнения. Последние два шага метода мы подробнее осветим в следующем разделе. Здесь, однако, отметим, что для решения дискретных уравнений Ляпунова можно выбирать различные методы [17]. Для расчётов ниже мы используем два из них. Во-первых, итерационный алгоритм, базирующийся на представлении решения в виде ряда (метод Дэвисона — Мэна). Этот подход был почти одновременно описан в работах [18], [19] и позднее многократно представлен различными авторами (подробный литературный обзор см. [17]). Во-вторых, прямой метод решения СЛАУ [20] (метод Китагавы). Полученные два варианта метода Садкане — Сиджи будем обозначать S-S(D-M) и S-S(K).

Несмотря на то, что сравнение итерационных методов не всегда корректно, так как и скорость и точность зависят от выбора критерия остановки итераций, проведём следующий численный эксперимент. Для матриц различной размерности n, элементы которых являются равномерно распределёнными на интервале $[0, 1]$ случайными числами, вычисляется решение обобщённого уравнения Ляпунова с помощью модифицированного алгоритма Малышева и с помощью методов S-S(D-M) и S-S(K), при этом фиксируются значения

$$\alpha = \|PA - AP\|, \qquad \beta = \|H - r^{-2}A^*HA - P^*P + (I - P)^*(I - P)\|,$$

характеризующие точность проектора и невязку уравнения, а также t — время выполнения программы в секундах. Для каждого n вычисления повторяются 15 раз, затем значения усред-

няются. В ортогональных исключениях используется 2-й вариант условия сходимости (см. выше) при $\varepsilon_{it} = 10^{-10}$, алгоритм Дэвисона — Мэна взят в редакции, описанной ниже в разд. 3 при $\varepsilon_{it} = 10^{-10}$.

В данной конфигурации точность вычисления проектора с помощью метода Садкане — Сиджи оказалась выше (рис. 5(a)), при том что невязка уравнения наоборот меньше при использовании метода Малышева (рис. 5(b)). То есть в вопросе точности сравнение не выявило однозначного преимущества того или иного метода. При этом сравнение времени работы алгоритмов (рис. 5(c, d)) показало, что итерационный метод решения уравнения Ляпунова значительно быстрее, чем метод Китагавы, в то время как методы Малышева и Садкане — Сиджи (с использованием алгоритма Дэвисона — Мэна) практически равны по скорости.

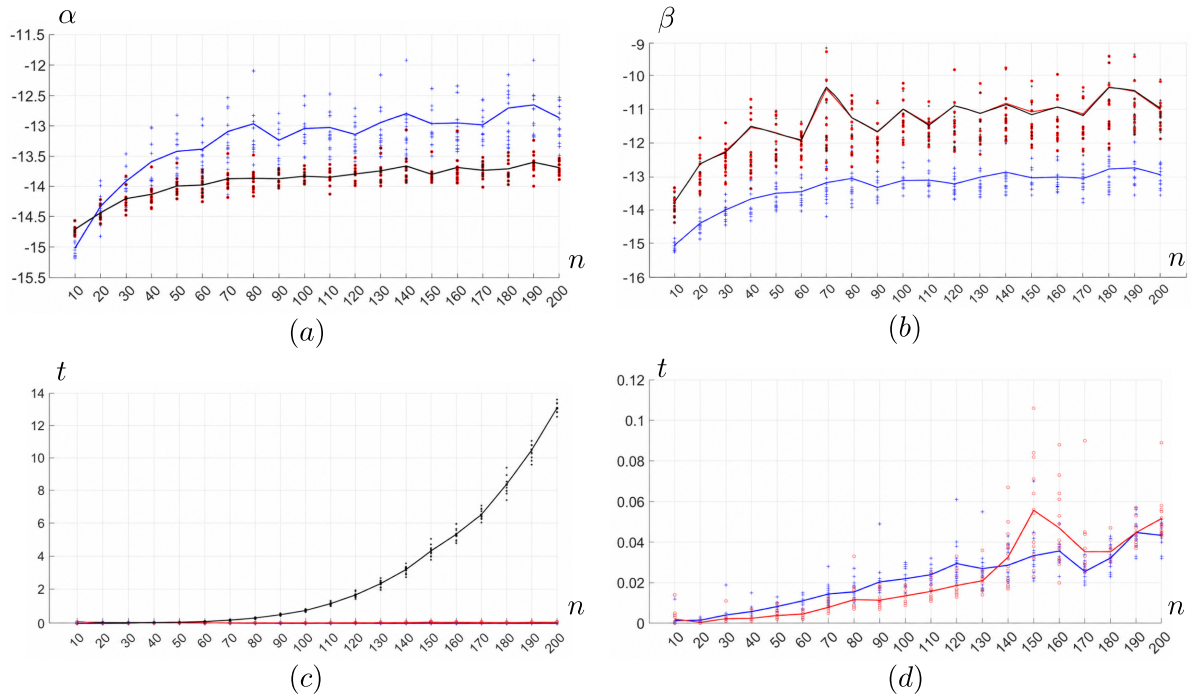
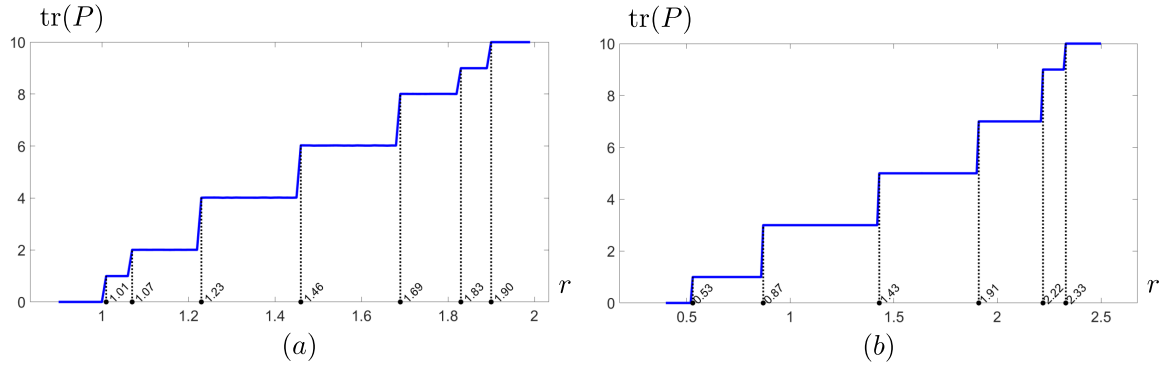


Рис. 5. Сравнение точности и скорости алгоритмов:
синий цвет — метод Малышева;
красный — метод Садкане — Сиджи с использованием алгоритма Дэвисона — Мэна;
чёрный — метод Садкане — Сиджи с использованием алгоритма Китагавы

Для построения графиков (см. рис. 5) использовалась программа, текст которой размещён по следующей ссылке https://github.com/nouar1-23/Discrete-Lyapunov-Methods-Benchmark

Вычислим с помощью метода Садкане — Сиджи и построим графики $\operatorname{tr} P(r)$ для проекторов на инвариантные подпространства матриц A_1, A_3 (см. (1)), соответствующие собственным значениям, лежащим внутри окружности радиуса r. След проектора это кусочно-постоянная функция, причём расположение скачков от одного значения к другому соответствует модулям собственных значений, разница между двумя соседним значениями равна числу собственных значений с одним модулем. Как видно на рис. 6, в данном случае следы полученных проекторов не соответствуют расположению собственных значений, что является следствием использования QR-алгоритма, лежащего в основе метода Садкане — Сиджи и характеризует его работу при наличии крупных пятен псевдоспектра.

Для построения графиков (рис.6) использовалась программа, текст которой размещён по следующей ссылке https://github.com/nouar1-23/Trace-of-Projector



(a) (b)

Рис. 6. Графики следов проекторов на инвариантные подпространства матриц: (a) A_1, (b) A_3, вычисленные методом Садкане — Сиджи

3. КОМБИНИРОВАННЫЙ МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ СПЕКТРАЛЬНЫХ ПОРТРЕТОВ

3.1. Описание алгоритмов

Для ускорения построения спектральных портретов мы используем комбинацию алгоритмов Малышева и Дэвисона — Мэна.

Напомним, что разрешимость дискретного уравнения Ляпунова

$$H - A^* H A = C, \tag{11}$$

определяется известной теоремой (см. [1, 17, 21]), которая при условии $|\lambda_k(A)| < 1$ на все собственные значения матрицы A гарантирует существование единственного решения и его представления в виде ряда

$$H = \sum_{j=0}^{\infty} (A^*)^j C A^j.$$

Заметим, что частичные суммы $H_j = \sum_{n=0}^{j} (A^*)^n C A^n$ при $j = 2^k$ удовлетворяют следующим рекуррентным соотношениям:

$$H_{2^k} = \mathcal{H}_k = \mathcal{H}_{k-1} + A^{*2^{k-1}} \mathcal{H}_{k-1} A^{2^{k-1}}, \tag{12}$$

где $k = 1, 2, \ldots$, $\mathcal{H}_0 = C$. Нетрудно получить неравенство, определяющее скорость их сходимости $\|H - \mathcal{H}_k\| \leqslant \|A^{2^k}\|^2 \|H\|$. Представление (12) является основой алгоритма Дэвисона — Мэна (см. [17]).

Алгоритм 3.

Дано: матрица A, ε_{it} — критерий сходимости, $\omega_{\max}$ — максимально допустимая норма решения, $\mathcal{H}_0 = C$.

Шаг 1. Инициализация: $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_0 + A^* \mathcal{H}_0 A, \quad s = 1.$

Шаг 2. while $\|\mathcal{H}_1 - \mathcal{H}_0\|_{\max} > \varepsilon_{it}$ **and** $\|\mathcal{H}_1\|_{\max} < w_{max}$ **and** $s < 5$

$s = s + 1$

for $i = 1 : 3$

Вычисляем $A = A^2$.

Заменяем $\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_1$,

$\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_0 + A^* \mathcal{H}_0 A$.

end for.
end while.

Перейдём теперь к решению обобщённого уравнения Ляпунова (7). Следующая теорема даёт возможность выразить его через решения двух дискретных уравнений Ляпунова вида (11).

Теорема 3.1. *Если спектр матрицы A делится на две части окружностью радиуса r, тогда имеют место представления*

$$A = T \begin{bmatrix} A_- & 0 \\ 0 & A_+ \end{bmatrix} T^{-1}, \qquad H = T^{-*} \begin{bmatrix} U_- & 0 \\ 0 & U_+ \end{bmatrix} T^{-1},$$

где $|\lambda_j(A_-)| < r$, $|\lambda_j(A_+)| > r$, а U_- и U_+ решения уравнений Ляпунова

$$U_- - \frac{1}{r^2} A_-^* U_- A_- = W_-, \tag{13}$$

$$U_+ - r^2 A_+^{-*} U_+ A_+^{-1} = r^2 A_+^{-*} W_+ A_+^{-1}, \tag{14}$$

$$W = T^*T = \begin{bmatrix} W_- & \times \\ \times & W_+ \end{bmatrix}.$$

Доказательство. Клеточно-диагональное представление матрицы A следует из теоремы Шура (подробнее см. [1], с. 25). Из него вытекает представление для проекторов на инвариантные подпространства

$$P = T \begin{bmatrix} I_- & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} T^{-1}, \quad I - P = T \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & I_+ \end{bmatrix} T^{-1}. \tag{15}$$

Далее в [1] на с. 60–63 обосновано разложение $H = H_- + H_+$, где слагаемые $H_\pm$, удовлетворяют уравнениям

$$H_- - \frac{1}{r^2} A^* H_- A = P^* P, \tag{16}$$

$$H_+ - \frac{1}{r^2} A^* H_+ A = -(I - P)^*(I - P), \tag{17}$$

а также могут быть представлены в следующем виде

$$H_- = T^{-*} \begin{bmatrix} U_- & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} T^{-1}, \quad H_+ = T^{-*} \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & U_+ \end{bmatrix} T^{-1}. \tag{18}$$

Подставляя (18) и (15) в уравнение (16), получаем следующее равенство

$$T^{-*} \begin{bmatrix} U_- & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} T^{-1} - \frac{1}{r^2} T^{-*} \begin{bmatrix} A_-^* & 0 \\ 0 & A_+^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_- & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_- & 0 \\ 0 & A_+ \end{bmatrix} T^{-1}$$
$$= T^{-*} \begin{bmatrix} I_- & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} T^* T \begin{bmatrix} I_- & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} T^{-1} = T^{-*} \begin{bmatrix} W_- & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} T^{-1}. \tag{19}$$

Отсюда следует справедливость равенства (13). Аналогичным образом равенство (14) следует из подстановки (18) и (15) в уравнение (17). □

На этой теореме основывается новый алгоритм для нахождения решения обобщённого уравнения Ляпунова (7) с использованием Алгоритма 3 для нахождения решений U_-, U_+.

Алгоритм 4.

Дано: радиус окружности r, матрицы A_-, A_+, приводящая матрица T, матрица $W = T^*T$, параметр сходимости ε_{it}, максимально допустимое значение нормы решения $\omega_{\max}$, m_0 — максимально допустимое число итераций.
Шаг 1. Применение Алгоритма 3 к матрицам $A := A_-/r, \quad \mathcal{H}_0 := W_-$
Результат: U_-
Шаг 2. Применение Алгоритма 3 к матрицам $A := rA_+^{-1}, \quad \mathcal{H}_0 := A^*W_+A$
Результат: U_+
Шаг 3. Вычисление решения:

$$H = T^{-*}\begin{bmatrix} U_- & 0 \\ 0 & U_+ \end{bmatrix} T^{-1}.$$

Результат H.

Перейдём к формулировке алгоритма построения одномерного спектрального портрета, сочетающего в себе Алгоритмы 3 и 4.

Алгоритм 5.

Дано: матрица A, $a = r_0 < r_1 < \cdots < r_M = b$ — значения радиусов окружностей, для которых будет решаться система (7), $\omega_{\max}$ — максимально допустимое значение нормы решения
$j := 0$
Шаг 1. Применение алгоритма дихотомии
Применение Алгоритма 2 к матрице A и радиусу r_j.
Результат: $m(j) = \|H\|_{\max}$, P
Шаг 2. Вычисления
$k = \mathrm{tr}(P)$ % Число собственных значений внутри окружности радиуса r_j
$\begin{bmatrix}[U_1, W_1], \Sigma_1, V_1\end{bmatrix} := \mathrm{svd}(P)$
$\begin{bmatrix}[U_2, W_2], \Sigma_2, V_2\end{bmatrix} := \mathrm{svd}(I - P)$
$T := [U_1, U_2]$ % Вычисление приводящей матрицы

$$\begin{bmatrix} A_- & 0 \\ 0 & A_+ \end{bmatrix} := T^{-1}AT$$

Шаг 3. for $j = 1 : M$
if $m(j-1) < \omega_{\max}$
Применение алгоритма Дэвисона-Мэна
Применение Алгоритма 4 к матрицам A_-, A_+, T, радиусу r_j
Результат: $m(j) = \|H\|_{\max}$
else
Применение алгоритма дихотомии
Применение Алгоритма 2 к матрице A и радиусу r_j.
Результат: $m(j) = \|H\|_{\max}$, P
Вычисления
$k = \mathrm{tr}(P)$
$\begin{bmatrix}[U_1, W_1], \Sigma_1, V_1\end{bmatrix} := \mathrm{svd}(P)$
$\begin{bmatrix}[U_2, W_2], \Sigma_2, V_2\end{bmatrix} := \mathrm{svd}(I - P)$
$T := [U_1, U_2]$

$$\begin{bmatrix} A_- & 0 \\ 0 & A_+ \end{bmatrix} := T^{-1}AT$$

end if
end for

Результат: массив m, элементами которого являются нормы решения обобщённого уравнения Ляпунова в точках r_j.

Алгоритм был реализован на языке Octave, доступ к программе можно получить по ссыле https://github.com/nouar1-23/combined-method-1d-spectral-portraits

Новый алгоритм отличается от алгоритма Малышева тем, что метод дихотомии применяется только при больших значениях $\|H\|_{\max}$ (см. условие в **шаге 3**), а значит только в небольшой окрестности собственного значения. При этом учитывается, что проектор не изменяется между двумя последовательными собственными значениями. За счёт этого удаётся значительно снизить вычислительные затраты.

3.2. Численные эксперименты

3.2.1. Построение спектрального портрета.

Рассмотрим следующие двухдиагональные матрицы, которые отличаются только второй диагональю:

$$A=\begin{bmatrix} 30 & 14 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 25 & 10 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 20 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 15 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7 & 0.1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5.1 & 0.01 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5.01 & 0.01 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5.001 \end{bmatrix}, \quad B=\begin{bmatrix} 30 & 14 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 25 & 10 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 20 & 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 15 & 3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 7 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5.1 & 20 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5.01 & 30 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5.001 \end{bmatrix}.$$

На их примере продемонстрируем работу алгоритмов 2 и 5 при построении спектральных портретов для значений параметра r_j, принадлежащего интервалу $(0, 35)$ с шагом $h = 0.01$. В алгоритмах используются константы: $\varepsilon = 10^{-10}$, $\omega_{\max} = 10^{16}$.

В верхнем ряду рис. 7 изображены одномерные радиальные портреты матриц A и B. Ниже расположены графики, отражающие сходимость вычисленных приближений матриц $H(r)$. На них синим цветом представлены результаты расчётов с помощью нового комбинированного алгоритма, а красным — с помощью метода Малышева. В нижней части рис. 7 приведены графики, демонстрирующие число потребовавшихся итераций. Здесь красная линия представляет число итераций Алгоритма 2, синяя линия — количество итераций для нахождения решения U_-, а зелёная линия — количество итераций для нахождения решения U_+ (Алгоритм 3). Данные результаты показывают, что результат вычислений и его точность близки для обоих методов. При этом число итераций, требующееся для сходимости метода уточнений, в среднем ниже. Напомним, что итеративные уточнения применяются к матрицам $U_\pm$, чей размер меньше размера исходной матрицы, и не требуют использования QR-разложения. Эти факторы влияют на время выполнения алгоритма и объясняют результаты, которые демонстрируются в следующем разделе.

Для получения графиков на рис. 7 можно использовать программу, размещённую по следующей ссылке: https://github.com/nouar1-23/spectral-comparison-matrices-A-B

3.2.2. Сравнение времени выполнения алгоритмов.

Данный вычислительный эксперимент организован следующим образом. Сначала задаётся случайная матрица размера $n = 10$, где все элементы равномерно распределены в диапазоне $(0, 1)$. Для каждого из двух алгоритмов фиксируется время, необходимое для вычисления спектральных портретов на интервале $[1, 2]$ с шагом $h = 0.1$. Для остановки итераций

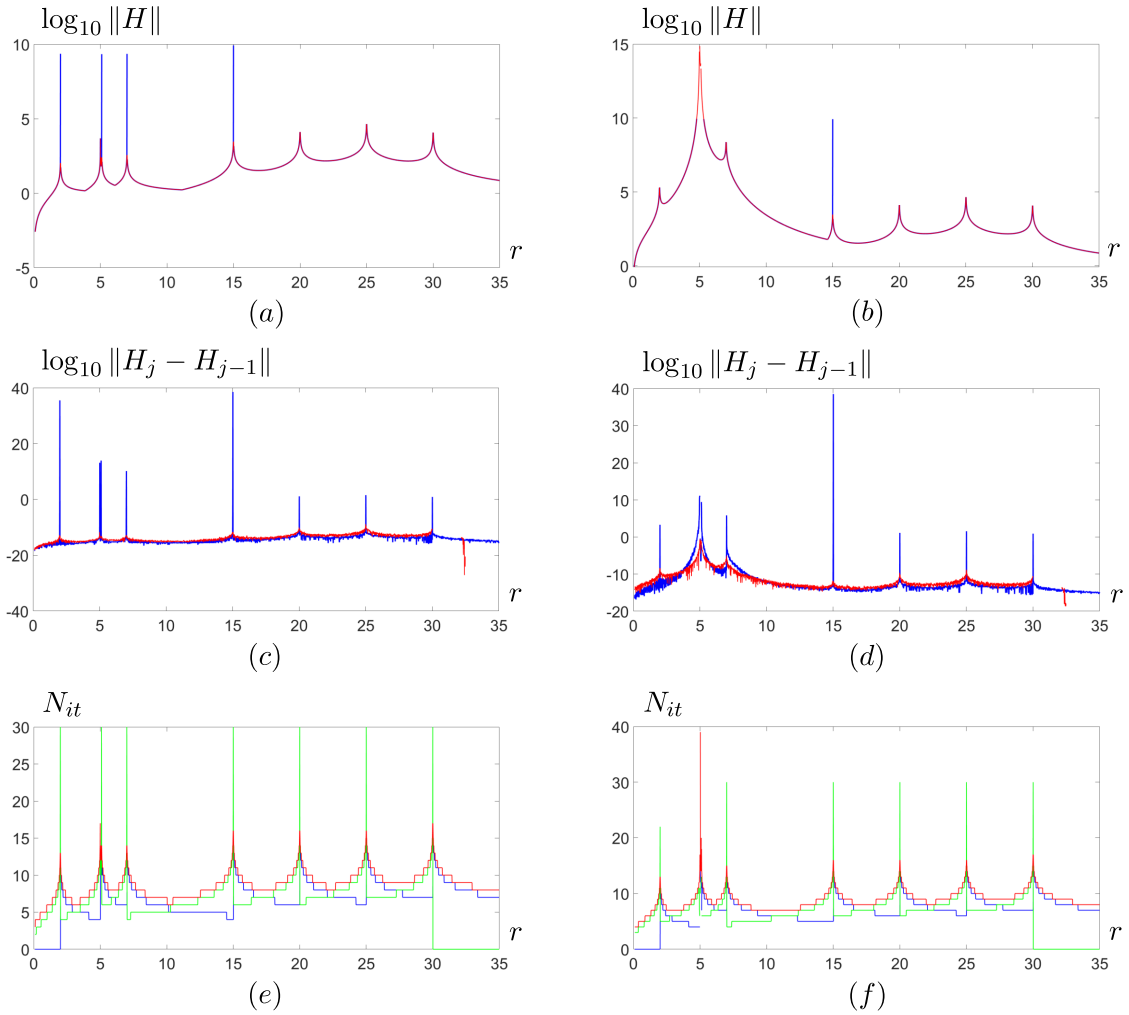


Рис. 7. Спектральные портреты матриц A, B и сравнение сходимости алгоритмов

используются константы $\varepsilon = 10^{-10}$, $\omega_{\max} = 10^{16}$. Затем расчёты повторяются три раза для различных матриц одного и того же размера, после чего вычисляется среднее арифметическое затраченного времени. Таким образом, проводится сравнение алгоритмов для матриц размеров $n = 10, 20, \ldots, 200$ (см. рис. 8).

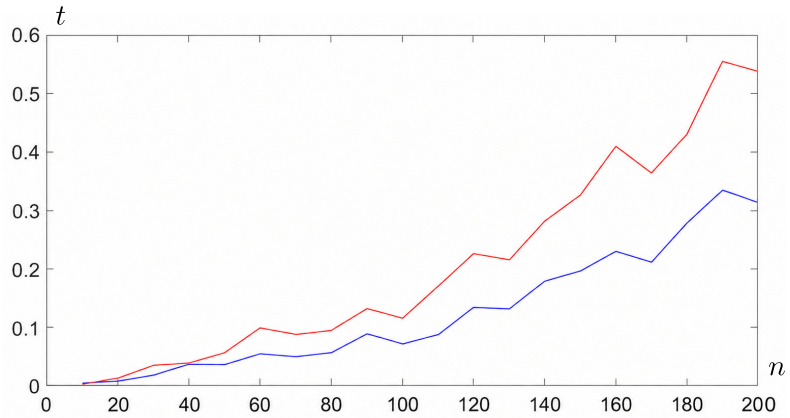


Рис. 8. Время, необходимое для вычисления спектральных портретов:
синий цвет — комбинированный метод; красный цвет — метод Малышева

Аналогичным образом было проведено сравнение алгоритмов для различных типов матрицов, в результате чего были получены графики, представленные на рис. 9. Численное сравнение и построение графиков в данном разделе произведено с помощью программы https://github.com/nouar1-23/spectral-portraits-performance-benchmarking

Вычислительные эксперименты показали ускорение построения спектральных портретов от 1.5 до 20 раз в зависимости от типа матрицы.

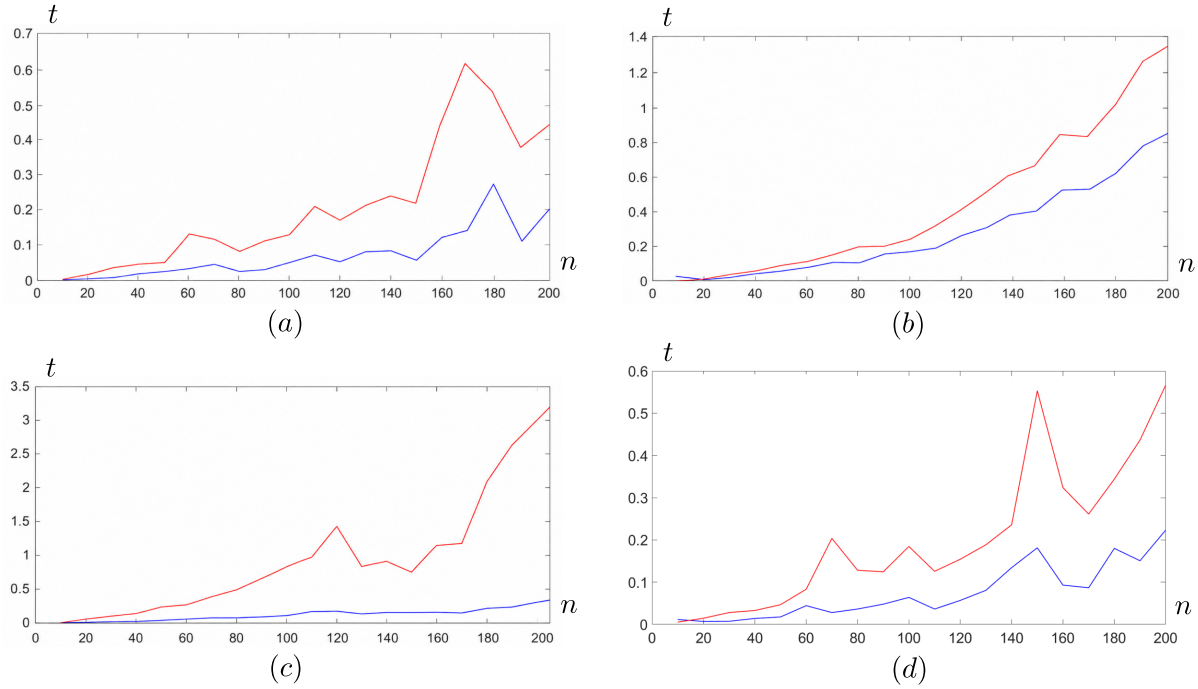


Рис. 9. Сравнение времени для матриц, элементы которых являются случайными числами: с экспоненциальным распределением (a); дискретным распределением (c); стандартным нормальным распределением (d); для эрмитовых матриц с равномерным распределением на интервале $(0, 1)$ (b). Синий цвет — комбинированный метод, красный цвет — метод Малышева

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассматриваются спектральные портреты, как инструмент для решения проблемы локализации матричного спектра и его чувствительности к возмущениям. Исследуются и сравниваются между собой различные способы построения одномерных спектральных портретов. Предложен новый комбинированный численный алгоритм, который сочетает в себе наиболее эффективные методы решения дискретных уравнений Ляпунова (7) на некотором интервале параметра r. Результаты вычислительных экспериментов продемонстрировали значительное — от 1.5 до 20 раз в зависимости от типа матрицы — ускорение по сравнению с алгоритмом Малышева А. Н., который в свою очередь является одним из наиболее быстрых среди аналогичных методов. Это указывает на перспективность предлагаемого подхода и его потенциальную применимость в задачах спектрального анализа.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках государственного задания Института математики СО РАН (проект № FWNF-2026-0028). 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. *Годунов С.К.* Лекции по современным аспектам линейной алгебры. Науч. кн., 2002.
2. *Буньков В.Г., Годунов С.К., Курзин В.В., Садкане М.* Применение нового математического аппарата «Одномерные спектральные портреты матрицы» к решению проблемы аэроупругих колебаний решёток лопастей // Учёные записки ЦАГИ. 2009. Т. 40, № 6. С. 3–13.
3. *Bai Z., Demmel J., Mckenney A.* On computing condition numbers for the nonsymmetric eigenproblem // ACM Transactions on Mathematical Software. 1993. V. 19, N 2. P. 202–223.
4. *Reddy S.C., Schmid P.J., Henningson D.S.* Pseudospectra of the Orr-Sommerfeld Operator // Socity for Industrial and Applied Mathematics. 1993. V. 53, N 1. P. 15–47.
5. *Godunov S.K., Sadkane M.* Spectral analysis of symplectic matrices with application to the theory of parametric resonance // SIAM J. Matrix Anal. Appl. 2006. V. 28, N 4. P. 1083–1096.
6. *Демиденко Г.В., Прохоров В.С.* О расположении матричного спектра относительно параболы // Матем. тр. 2023. Т. 26, № 1. С. 26–40.
7. *Годунов С.К.* Круговая дихотомия матричного спектра // Сиб. мат. журн. 1986. Т. 27, № 5. С. 24–37.
8. *Булгаков А.Я., Годунов С.К.* Круговая дихотомия матричного спектра // Сиб. мат. журн. 1988. Т. 29, № 5. С. 59–70.
9. *Малышев А.Н.* Гарантированная точность в спектральных задачах линейной алгебры // Труды Ин-та математики АН СССР. Сиб. отд-ние. 1990. Т. 17.
10. *Малышев А.Н.* Введение в вычислительную линейную алгебру. Новосибирск: Наука, Сибирское отделение. 1991.
11. *Godunov S.K., Sadkane M.* Elliptic dichotomy of a matrix spectrum // Linear Algebr Appl. 1996. V. 248. P. 205–232.
12. *Malyshev A.N., Sadkane M.* On parabolic and elliptic spectral dichotomy // SIAM J. Matrix Anal. Appl. 1997. Vol. 18, P. 265–278.
13. *Бибердорф Э.А., Блинова М.А., Попова Н.И.* Модификации метода дихотомии матричного спектра и их применение к задачам устойчивости // СибЖВМ. 2018. Т. 21, № 2. С. 139–153.
14. *Biberdorf E.A., Li W.* Application of linear fractional transformation in problems of localization of matrix spectra and roots of polynomials // Sib. Elec. Math. Reports. 2024. V.21, N 2. P. 46–63.
15. *Бибердорф Э.А., Митенкова Е.Ф., Семёнова Т.В.* О спектральной проблеме в задаче моделирования распределения нейтронов в слабосвязных системах // Сиб. журн. индустр. матем. 2024. Т. 27, № 1. С. 5–15.
16. *Sadkane M., Sidje R.B.* Efficient computation of the spectral projections of regular matrix pairs // J. Comput. Appl. Math. 2016. N 298. P. 72–81.
17. *Gajic Z., Qureshi M.T.J.* Lyapunov matrix equation in system stability and control. Courier Corporation, 2008.
18. *Davison E.J., Man F.T.* The numerical solution of $A'Q+QA=-C$ // IEEE Transactions on Automatic Control. 1968. V. 13, N 4. P. 448–449.
19. *Smith R. A.* Matrix equation $XA+BX=C$ // SIAM J. Appl. Math. 1968. V. 16, N 1. P. 198–201.
20. *Kitagawa, G.* An algorithm for solving the matrix equation $X=FXF'+S$ // Int. J. Control. 1977. V. 25, N 5. P. 745–753.
21. *Демиденко Г.В.* Матричные уравнения // Учеб. пособие. Новосибирск: Изд-во Новосиб. ун-та. 2009.

SIBERIAN JOURNAL OF INDUSTRIAL MATHEMATICS

UDC 519.61

ACCELERATED ALGORITHM FOR CONSTRUCTING ONE-DIMENSIONAL SPECTRAL PORTRAITS OF MATRICES

© 2026 N. Abdallah[1a], E. A. Biberdorf[2b]

[1] *Novosibirsk State University, Novosibirsk 630090, Russia,*
[2] *Sobolev Institute of Mathematics SB RAS, Novosibirsk 630090, Russia*

E-mails: [a]nouarabdallah111@mail.ru, [b]elina@biberdorf.ru

Received 29.12.2025, revised 21.09.2026, accepted 03.10.2026

Abstract. The paper presents an algorithm that accelerates the construction of one-dimensional spectral portraits of matrices, understood as graphs of the norm of the solution to the generalized discrete Lyapunov equation as a function of a parameter. The idea of the new approach is to partially replace the spectral dichotomy method with respect to a circle by computing the solutions of two classical discrete Lyapunov equations. Experiments have shown that the new method provides a significant speedup.

Keywords: spectral portraits, resolvent, matrix spectrum, spectral dichotomy, Lyapunov equation.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.301

REFERENCES

1. Godunov S.K. Modern Aspects of Linear Algebra. American Mathematical Society, 1998.
2. Bun'kov V.G., Godunov S.K., Kurzin V.V., Sadkane M. Primenenie novogo matematicheskogo apparata «Odnomernye spektral'nye portrety matritsy» k resheniyu problemy aerouprugikh kolebanii reshetok lopastei [Application of the new mathematical tool «One-dimensional spectral portraits of a matrix» to the solution of the problem of aeroelastic vibrations of blade cascades]. *Uchenye Zapiski TsAGI*, 2009, Vol. 40, No. 6, pp. 3–13 (in Russian).
3. Bai Z., Demmel J., Mckenney A. On computing condition numbers for the nonsymmetric eigenproblem . *ACM Transactions on Mathematical Software*, 1993, Vol. 19, No. 2, pp. 202–223.
4. Reddy S.C., Schmid P.J., Henningson D.S. Pseudospectra of the Orr-Sommerfeld Operator. *Socity for Industrial and Applied Mathematics*, 1993, Vol. 53, No. 1, pp. 15–47.
5. Godunov S.K., Sadkane M. Spectral analysis of symplectic matrices with application to the theory of parametric resonance. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 2006, Vol. 28, No. 4, pp. 1083–1096.
6. Demidenko G.V., Prokhorov V.S. On location of the matrix spectrum with respect to a parabola. *Siberian Adv. Math.*, 2023, Vol. 33, No. 3, pp. 190–199.
7. Godunov S.K. Circular dichotomy of the matrix spectrum. *Sib. Math. J.*, 1986, Vol. 27, No. 5, pp. 673–682.
8. Bulgakov A.Ya., Godunov S.K. Circular Dichotomy of the Matrix Spectrum. *Sib. Math. J.*, 1988, Vol. 29, No. 5, pp. 717–728.
9. Malyshev A.N. Garantirovannaya tochnost' v spektral'nykh zadachakh lineinoi algebry [Guaranteed accuracy in spectral problems of linear algebra]. *Trudy Inst. Mat. SO AN SSSR* [Proc. Institute of Mathematics of the USSR Academy of Sciences. Siberian Branch.], 1990, Vol. 17 (in Russian).

English translation is published in Journal of Applied and Industrial Mathematics, 2026, Vol. 20, No. 3.

10. Malyshev A.N. Vvedenie v vychislitel'nuyu lineinuyu algebru [Introduction to computational linear algebra]. Novosibirsk: Nauka, Sibirskoe otdelenie, 1991 (in Russian).

11. Godunov S.K., Sadkane M. Elliptic dichotomy of a matrix spectrum. *Linear Algebr Appl.*, 1996, Vol. 248, pp. 205–232.

12. Malyshev A.N., Sadkane M. On parabolic and elliptic spectral dichotomy. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 1997, Vol. 18, pp. 265–278.

13. Biberdorf E. A., Blinova M. A., Popova N. I. Modifications of the dichotomy method of a matrix spectrum and their application to stability tasks. *Num. Anal. Appl.*, 2018, Vol. 11, No. 2, pp. 108–120.

14. Biberdorf E.A., Li W. Application of linear fractional transformation in problems of localization of matrix spectra and roots of polynomials. *Sib. Elec. Math. Reports*, 2024, Vol.21, No. 2, pp. 46–63.

15. Biberdorf E.A., Mitenkova E.F., Semenova T.V. On the spectral problem of modeling neutron distribution in weakly coupled systems. *J. Appl. Industr. Math.*, 2024, Vol. 18, No. 1, pp. 10–17.

16. Sadkane M., Sidje R.B. Efficient computation of the spectral projections of regular matrix pairs. *J. Comput. Appl. Math.*, 2016. N 298. P. 72–81.

17. Gajic Z., Qureshi M.T.J. Lyapunov matrix equation in system stability and control. Courier Corporation, 2008.

18. Davison E.J., Man F.T. The numerical solution of $A'Q + QA = -C$. *IEEE Transactions on Automatic Control*, 1968, Vol. 13, No. 4, pp. 448–449.

19. Smith R.A. Matrix equation $XA + BX = C$. *SIAM J. Appl. Math.*, 1968, Vol. 16, No. 1, pp. 198–201.

20. Kitagawa, G. An algorithm for solving the matrix equation $X = FXF' + S$. *Int. J. Control*, 1977, Vol. 25, No. 5, pp. 745–753.

21. Demidenko G.V. Matrichnye uravneniya [Matrix equations]. Textbook. Novosibirsk. Izd-vo Novosib. un-ta. 2009 (in Russian).

УДК 621.365.5:669

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫХ, ТЕПЛОВЫХ И ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ЛЕВИТАЦИОННОЙ ПЛАВКЕ АЛЮМИНИЕВЫХ ИЗДЕЛИЙ

© 2026 М. Н. Андреев[a], А. Э. Морев[b]

Новосибирский государственный технический университет, просп. К. Маркса, 20, Новосибирск 630073, Россия

E-mails: [a]andreev.maxim.1998@yandex.ru, [b]glhficcup@yandex.ru

Поступила в редакцию 10.09.2025 г.; после доработки 15.12.2025 г.; принята к публикации 13.05.2026 г.

Магнитогидродинамические (МГД) технологии широко применяются при производстве алюминиевых сплавов. Они обеспечивают эффективное перемешивание расплава, способствуют интенсификации процессов очистки и позволяют добиться однородного распределения температуры и химического состава. Растущий спрос на специализированные алюминиевые сплавы предъявляет более высокие требования к их качеству и эксплуатационным характеристикам, что стимулирует разработку нового МГД-оборудования, а также совершенствование существующих установок и технологических процессов. Одним из ключевых преимуществ левитационной плавки является исключение загрязнения расплава материалом тигля и другими веществами, контакт с которыми характерен для традиционных методов плавки. Настоящее исследование посвящено анализу электромагнитных и гидродинамических процессов в индукционной системе, предназначенной для левитационной плавки алюминиевых заготовок. В работе рассмотрены существующие подходы к численному моделированию подобных задач, отличительной особенностью которых является необходимость учёта взаимодействия различных физических полей. Вследствие сложности и узкой специализации таких задач возможности их моделирования зачастую ограничиваются доступным программным обеспечением. Комплексное исследование рассматриваемых процессов требует совместного применения методов электромагнитного и гидродинамического моделирования. Также представлены результаты численного моделирования МГД-задачи с обратной связью, выполненного с использованием оригинальной программы, разработанной для интерполяции полевых величин.

Ключевые слова: переменное магнитное поле, магнитная гидродинамика, термодинамика, левитационная плавка, метод контрольных объёмов, мультифизика.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.302

ВВЕДЕНИЕ

Современные технологии требуют совершенствования методов обработки металлов, особенно алюминия. Одним из перспективных решений является левитационная плавка, при которой плавление происходит без контакта с тиглем благодаря удержанию расплавляемого металла во взвешенном состоянии посредством электромагнитного поля. Это обеспечивает высокую чистоту и однородность расплава. Изучение тепловых, электромагнитных и гидродинамических процессов при такой плавке важно для оптимизации технологии и повышения её эффективности. Практически это позволяет точно управлять параметрами процесса, улучшать качество продукции и снижать экологические и эксплуатационные издержки, что особенно актуально для авиационной, электронной и других отраслей.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Магнитогидродинамические задачи относятся к категории сопряжённых или мультифизических задач, поскольку они охватывают взаимодействие различных физических явлений. Их сложность обусловлена тем, что такие процессы находятся на границе электромагнетизма и гидродинамики, что требует одновременного учёта законов обеих областей физики. Это делает магнитогидродинамическое моделирование особенно требовательным к вычислительным ресурсам и программному обеспечению, поскольку универсальные инструменты для решения подобных задач встречаются относительно редко и зачастую обладают узкой специализацией. Задача левитационной плавки решается численным методом с обратной связью. Электромагнитный решатель по окончанию своего действия выдаёт поле объёмных сил и Джоулево тепло, которые используются как источниковые члены в CFD-решателе, а он после расчёта выдаёт поле объёмной доли, являющееся критерием для перестроения геометрии свободной поверхности расплава, и температурное поле [1]–[4]. Для обмена данными между двумя решателями нам необходим алгоритм сопряжения. Поскольку электромагнитные и гидродинамические решатели имеют разную сетку, основаны на разных методах решения, нам необходимо передать значения с одной объёмной сетки на другую. Для передачи данных между решателями использовался разработанный и запатентованный программный комплекс [5]. На рис. 1 представлен алгоритм взаимодействия решателей.

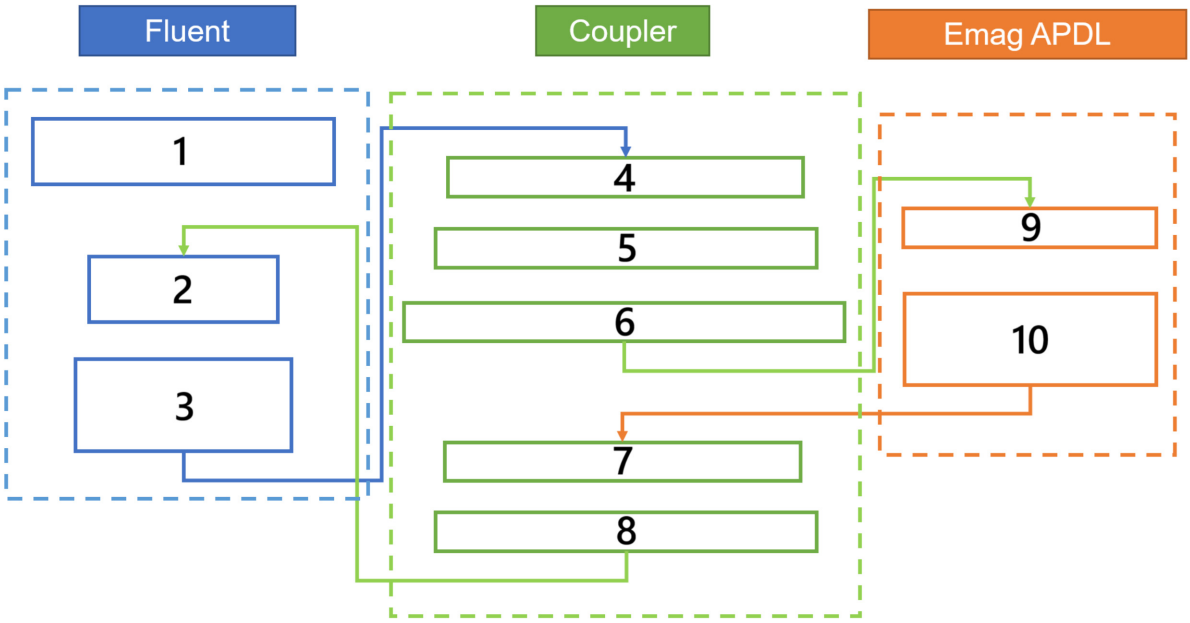


Рис. 1. Алгоритм взаимодействия решателей:
1 — Задание начальной свободной поверхности; 2 — решение CFD части;
3 — выгрузка поля VoF $f(x, y, z)$ и температур; 4 — копирование файлов;
5 — маппирование Fluent–APDL; 6 — сортировка массива для APDL;
7 — копирование файлов; 8 — маппирование APDL–Fluent; 9 — решение Emag части;
10 — выгрузка сил Лоренца $f(x, y, z)$ и мощности q_V

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МГД ЗАДАЧИ

Для исследования электромагнитных, тепловых и гидродинамических процессов, протекающих в индукционной системе для левитационной плавки алюминиевой заготовки весом 18,6 грамм была разработана численная модель в программном комплексе Ansys, представленная

на рис. 2. Эта модель позволяет рассчитывать ключевые параметры установки, включая распределение плотности тока и сил Лоренца в расплаве, активную потребляемую мощность, температурное поле, структуру потока жидкого металла, а также форму его свободной поверхности. Для исследования этих процессов была рассмотрена индукционная система с индуктором, разделённым на нижнюю часть, обеспечивающую основную левитирующую силу, и верхнюю обмотку, стабилизирующую расплавляемую заготовку во взвешенном состоянии [3, 6].

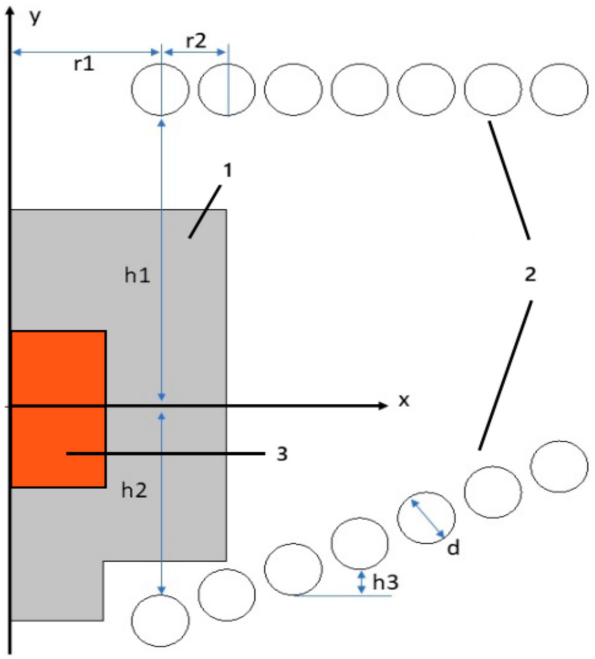


Рис. 2. Расчётная схема индукционной системы левитационной плавки:
1 — воздух; 2 — индуктор; 3 — заготовка;
$h_1 = 34$ мм; $h_2 = 22$ мм; $h_3 = 3$ мм;
$r_1 = 16$ мм; $r_2 = 7$ мм; $d = 6$ мм

2.1. Электромагнитная задача

В рассматриваемой индукционной системе задано действующее значение тока $I = 650$ А с частотой $f = 9650$ Гц. Электромагнитная задача решается методом конечных элементов. Свойства воздуха, меди и алюминия для электромагнитной задачи представлены в табл. 1.

Таблица 1

Свойства материалов и среды для электромагнитной задачи

	Воздух	Медь	Алюминий
Относительная магнитная проницаемость	1	1	1
Удельное электрическое сопротивление $\Omega \cdot m$	10^{30}	$2 \cdot 10^{-8}$	$2.82 \cdot 10^{-8}$ (20°C) $3.73 \cdot 10^{-8}$ (100°C) $4.86 \cdot 10^{-8}$ (200°C) $6.00 \cdot 10^{-8}$ (300°C) $7.13 \cdot 10^{-8}$ (400°C) $8.26 \cdot 10^{-8}$ (500°C) $9.40 \cdot 10^{-8}$ (600°C) $24.00 \cdot 10^{-8}$ (660°C, 1) $25.80 \cdot 10^{-8}$ (700°C, 1)

Электромагнитное поле описывается уравнениями Максвелла (1)–(4), законом Ома (5), и сохранения заряда (6). В МГД задачах проводящая жидкость движется за счёт сил Ампера (7):

$$\nabla \vec{E} = \frac{\rho_e}{\epsilon_0}, \tag{1}$$

$$\nabla \vec{H} = 0, \tag{2}$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}, \tag{3}$$

$$\nabla \times \vec{H} = \mu_0 \vec{j} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}, \tag{4}$$

$$\vec{j} = \sigma \vec{E}, \tag{5}$$

$$\frac{\partial \rho_e}{\partial t} + \nabla \vec{j} = 0, \tag{6}$$

$$\vec{f} = \vec{j} \times \vec{B}, \tag{7}$$

где $\vec{E}$ — напряжённость электрического поля, $\vec{H} = \vec{B}/\mu\mu_0$ — напряжённость магнитного поля, ρ_e — плотность заряда, ϵ_0 — диэлектрическая постоянная вакуума, μ_0 — магнитная проницаемость вакуума, $\vec{j}$ — плотность тока, σ — удельная электропроводность [6].

Последний член в уравнении (4) $\frac{1}{c^2}\frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$ — ток смещения, в случае электромагнитной левитации жидкого металла им можно пренебречь. Плотность заряда ρ_e здесь также не имеет значения. Известно, что электрические заряды (свободные электроны) в металле перераспределяются для компенсации внешнего электрического поля. В случае переменного поля, поскольку время релаксации электрических зарядов $\tau = \epsilon_0/\sigma$ намного меньше периода колебаний электромагнитного поля, можно считать, что в каждый момент времени заряды достигли равновесного распределения [7, 8].

Численное решение вышеуказанных уравнений обычно предполагает введение векторного магнитного потенциала $\vec{A}$ ($\vec{B} = \nabla \times \vec{A}$). Из уравнения (3) следует, что $\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t} - \nabla\phi$, где ϕ — скалярный электрический потенциал. Эти уравнения решаются относительно векторного магнитного потенциала и скалярного электрического потенциала. В данной задаче приложенные напряжения отсутствуют, поэтому $\nabla\phi = 0$ и, следовательно, $\vec{E} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$. В осесимметричном двумерном случае в плос-кости XY закон Ампера (4) имеет вид:

$$\sigma \frac{\partial A_z}{\partial t}\vec{e_z} + \nabla \times \left(\frac{1}{\mu_0}\nabla A_z \vec{e_z}\right) = j_z \vec{e_z}, \tag{8}$$

где j_z — плотность тока. В данном исследовании уравнение (8) решает Ansys APDL для получения A_z, после чего вычисляются все остальные электромагнитные величины как шаг постобработки [2]. В случае электромагнитной левитации, поскольку частота магнитного поля высока (выше, чем колебания поверхности жидкости), зависимостью магнитного поля от времени можно пренебречь, и в моделировании течения жидкости можно использовать только усреднённые по времени силы. Моделирование электромагнитного воздействия переменного тока предполагает использование комплексных чисел. Гармонический ток с угловой частотой ω может быть записан в комплексном виде [11]:

$$j\,(t) = j_0 \cos\left(\omega t + \phi\right) = \mathrm{Re}(j_c e^{i\omega t}) \tag{9}$$

где j_0 — амплитуда тока, j_c — комплексная амплитуда тока, ϕ — фаза. Используя комплексный вид для всех переменных, уравнение (8) примет вид

$$\sigma i\omega A_{zc}\vec{e_z} + \nabla \times \left(\frac{1}{\mu_0}\nabla \times A_{zc}\vec{e_z}\right) = j_{zc}\vec{e_z}, \tag{10}$$

где дополнительный индекс с обозначает комплексную переменную. Уравнение (10) будет решено Ansys APDL, в данной задаче j_{zc} является плотностью тока в обмотках индуктора. Поскольку частота высока (по сравнению со свободными поверхностными колебаниями), моделирование течения жидкости будет использовать усреднённую по времени плотность сил Ампера в качестве сил тела, что в сложном гармоническом случае задаётся следующим образом:

$$f_{L,AC} = \frac{1}{2}\,\mathrm{Re}(\vec{j} \times \vec{B}^*), \tag{11}$$

где звёздочка обозначает комплексное сопряжение [7, 8].

2.2. Теплогидродинамическая задача

Теплогидродинамическая задача была решена с помощью явной модели VOF $k-\omega$ SST и учётом массовых сил. Для моделирования процесса плавления алюминия использовалась модель PCM. В задаче присутствуют две Эйлеровы фазы: воздух и алюминий. Свойства воздуха для теплогидродинамической задачи представлены в табл. 2.

Таблица 2

Свойства воздуха для теплогидродинамической задачи

Физические свойства	Воздух
Коэффициент поверхностного натяжения, Н/м	—
Плотность, кг/м^3	1.225
Вязкость, мПа·с	$1.79{\cdot}10^{-2}$

Свойства алюминия для теплогидродинамической задачи представлены в табл. 3.

Для описания теплогидродинамической задачи был использован метод конечных объёмов для несжимаемой жидкости в предположении постоянной вязкости. Поток несжимаемой жидкости описывается уравнениями Навье — Стокса:

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v}\cdot\nabla)\vec{v} = -\nabla\left(\frac{p}{\rho}\right) + \nu\Delta\vec{v} + \frac{\vec{f}}{\rho}, \tag{12}$$

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0, \tag{13}$$

где ρ — плотность жидкости, ν — кинематическая вязкость жидкости, p — давление, $\vec{f}$ — источниковый член уравнения движения, которым в данном случае является сила Лоренца, полученная в электромагнитном расчёте [9]–[11]. Уравнение (12) в безразмерной форме имеет вид

$$\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v}\cdot\nabla)\vec{v} = -\nabla\left(\frac{p}{\rho}\right) + \frac{1}{Re}\nu\Delta\vec{v} + \frac{\vec{f}}{\rho}, \tag{14}$$

где все переменные теперь безразмерные, $\mathrm{Re} = UL/\nu$ — число Рейнольдса, U — масштаб скорости, L — масштаб длины. Число Рейнольдса характеризует отношение инерционных сил к силам вязкого трения в вязких жидкостях и газах. Оно также используется для определения турбулентности потока. В данной работе исследуемый поток имеет $\mathrm{Re} = 6908$.

Таблица 3

Свойства алюминия для теплогидродинамической задачи

Температура, ∘C	Теплопроводность, Вт/(м·K)	Плотность, кг/м^3	Коэффициент поверхностного натяжения, Н/м	Вязкость, мПа·с
20	237	2699	—	—
100	240	2689	—	—
200	238	2673	—	—
300	235	2655	—	—
400	230	2635	—	—
500	220	2613	—	—
600	210	2589	—	—
660 (l)	95	2375	0.880	1.375
700 (l)	97	2368	0.875	1.127
Удельная теплота плавления, кДж/кг			396	
Температура солидус, °C			660	
Температура ликвидус, °C			660	

В данной работе использовалась RANS модель турбулентности $k-\omega$ SST. Существуют различные модели, описывающие многофазные потоки. С вычислительной точки зрения популярной моделью двух несмешивающихся жидкостей является модель объёма жидкости (VOF). Она предполагает решение дополнительного уравнения для скалярной переменной, называемой объёмной долей β:

$$\frac{\partial \beta \vec{v}}{\partial t} + \nabla(\beta \rho \vec{v}) = 0, 0 \leqslant \beta \leqslant 1, \tag{15}$$

$\beta = 1$ для жидкостей и $\beta = 0$ для других сред. Модель VOF позволяет решить только один набор уравнений для всех фаз. Плотность и вязкость тогда можно найти, как представлено в работе [12]:

$$\rho = \beta \rho_1 + (1 - \beta)\rho_2, \tag{16}$$

$$\mu = \beta \mu_1 + (1 - \beta)\mu_2, \tag{17}$$

где индексы 1 и 2 обозначают жидкость 1 и 2 соответственно. При электромагнитной левитации жидкий металл имеет свободную поверхность, и силы поверхностного натяжения играют важную роль. Поверхностное натяжение — это касательное напряжение вдоль поверхности. Эффект поверхностного натяжения заключается в стремлении жидкости минимизировать свою свободную поверхность. Это приводит к появлению дополнительного давления в объёме жидкости, пропорционального коэффициенту поверхностного натяжения и обратно пропорционального местной кривизне поверхности. Это давление поверхностного натяжения нормально к поверхности и поэтому может быть смоделировано как нормальные силы. Численно, используя модель VOF, это легко реализовать как дополнительную объёмную силу, действующую только на поверхности (где $\nabla \beta \neq 0$) [12, 13]:

$$\vec{f_s} = \gamma \kappa \nabla \beta, \tag{18}$$

где $\kappa = -\nabla\vec{n}$ — кривизна поверхности, $\vec{n}$ — нормаль к поверхности, γ — коэффициент поверхностного натяжения.

Ещё одна важная объёмная сила при решении задач со свободной поверхностью это гравитация:

$$\vec{f_g} = \rho\vec{g}, \tag{19}$$

где $\vec{g}$ — ускорение свободного падения.

При решении задачи с электромагнитным воздействием на поток, а также со свободной поверхностью источниковый член уравнения движения можно записать в виде

$$\vec{f} = \gamma\kappa\nabla\beta + \rho\vec{g} + \vec{f_L}, \tag{20}$$

Основой для моделирования тепловых процессов служит уравнение теплопроводности Фурье, которое описывает изменение температурного поля $T(r,t)$ во времени и пространстве:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla\cdot(\lambda\nabla T) + q_V, \tag{21}$$

где ρ — плотность материала, c_p — удельная теплоёмкость при постоянном давлении, T — температура, λ — коэффициент теплопроводности, q_V — объёмная мощность тепловыделения (источниковый член).

Это уравнение является дифференциальным уравнением второго порядка в частных производных и описывает нестационарный процесс теплопередачи. Оно учитывает нестационарность процесса за счёт временной производной, Пространственное распределение тепла через дивергенцию теплового потока $\nabla\cdot(\lambda\nabla T)$ и внутренние источники тепла, задаваемые как q_V [14].

Источниковый член q_V в уравнении (21) может быть использован не только для учёта внешних источников тепла, но и для моделирования внутренних эффектов, связанных с фазовым переходом.

В данной задаче источниковым членом является Джоулев нагрев. Джоулев нагрев (резистивный нагрев) — это процесс выделения тепла при прохождении электрического тока через проводящий материал. Объёмная мощность тепловыделения q_V рассчитывается по формуле

$$q_V = |j|^2\rho_R, \tag{22}$$

где j — вектор плотности тока, ρ_R — удельное электрическое сопротивление.

При плавлении материал поглощает тепло без повышения температуры. Это явление связано с так называемой удельной теплотой плавления L, которая определяет количество теплоты, необходимое для перевода единицы массы вещества из твёрдого состояния в жидкое:

$$Q = mL, \tag{23}$$

где Q — количество теплоты, m — масса вещества, L — удельная теплота плавления.

Эта величина играет ключевую роль в моделировании фазовых переходов, поскольку позволяет учитывать затраты энергии на сам процесс плавления, даже если температура остаётся постоянной [14].

Для численного моделирования процессов плавления и кристаллизации используется модель Phase Change Material (PCM). Она предполагает, что фазовый переход происходит в некотором температурном интервале $[T_s,\ T_l]$, где T_s — температура начала плавления (солидус), T_l — температура окончания плавления (ликвидус).

Полная энтальпия материала H вычисляется как сумма энтальпии h_s и скрытой теплоты L:

$$H = h_s + \Delta H, \tag{24}$$

$$h_s = h_{ref} + \int\limits_{T_{ref}}^{T} c_p dT, \tag{25}$$

где h_{ref} — энтальпия при 20°C, $T_{\text{ref}} = 20$°C, c_p — удельная теплоёмкость.

Жидкую фазу металла β можно определить следующим образом:

$$\beta = \begin{cases} 0, & T < T_s, \\ 1, & T > T_l, \\ \dfrac{T - T_s}{T_l - T_s}, & T_s < T < T_l. \end{cases} \tag{26}$$

Скрытая теплота теперь может быть выражена через удельную теплоту плавления материала L

$$\Delta H = \beta L. \tag{27}$$

Содержание скрытой теплоты может изменяться от нуля (для твёрдого тела) до L (для жидкости).

Для задач кристаллизации/плавления уравнение энергии записывается как:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) + \nabla \cdot (\rho \vec{\nu} H) = \nabla \cdot (\lambda \nabla T) + S, \tag{28}$$

где ρ — плотность материала, $\vec{\nu}$ — скорость в расплаве, S — источниковый член.

Решение для температуры — это итерация между уравнением энергии (28) и уравнением доли жидкости (26). Прямое использование уравнения (26) для обновления доли жидкости обычно приводит к плохой сходимости уравнения энергии.

Такой подход позволяет использовать стандартные методы решения уравнения теплопроводности (21) не разрывая область на твёрдую и жидкую части, и обеспечивает гладкий переход между фазами [15, 16].

3. АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ

При решении данной МГД задачи с обратной связью был сформирован следующий алгоритм, который изображён на рис. 3.

1. Решаем электромагнитную задачу. Решение происходит с помощью программного пакета Ansys APDL. Строится нужная геометрия индуктора, заготовки и воздуха, затем присваиваем заданные свойствами материалов и среды, после чего накладываем конечно-элементную сетку, применяем необходимые граничные условия, ток и частоту, далее решаем электромагнитную задачу.

2. Выгружаем объёмные силы $F(x, y)$, действующие на заготовку и объёмную мощность тепловыделения q_V, которые получили при решении электромагнитной задачи.

3. Мапируем выгруженные объёмные силы $F(x, y)$ и объёмную мощность тепловыделения q_V на сетку теплогидродинамической части.

4. Применяем мапированные объёмные силы $F(x, y)$ и объёмную мощность тепловыделения q_V на стороне CFD решателя.

5. Решаем теплогидродинамическую задачу. Решение происходит с помощью программного пакета Ansys Fluent. Строится нужная геометрия воздуха и заготовки, накладывается

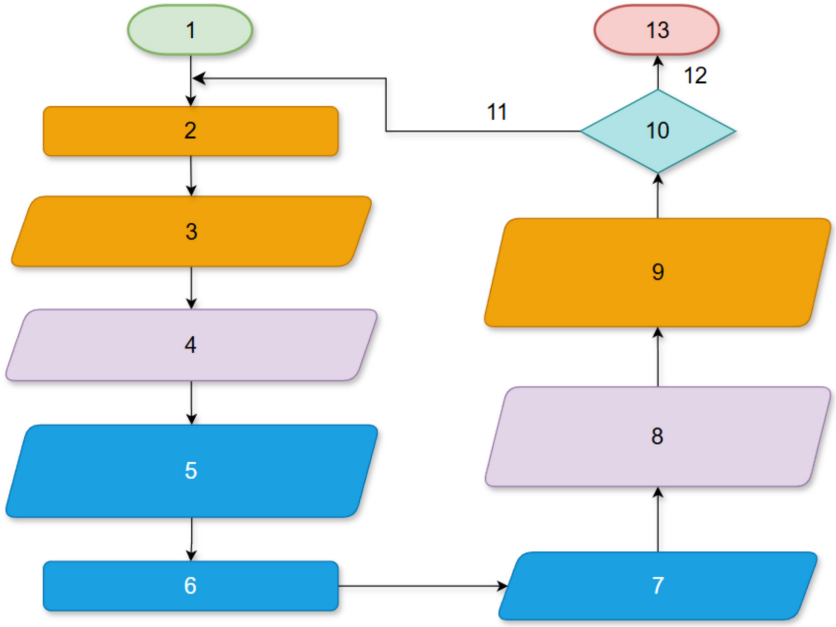


Рис. 3. Алгоритм решения МГД задачи с обратной связью:
1 — начало; 2 — решение Emag; 3 — выгрузка объемных сил $F(x, y)$ и мощности q_V;
4 — мапирование сил $F(x, y)$ и мощности q_V на сетку CFD;
5 — применение сил $F(x, y)$ и мощности q_V на стороне CFD решателя; 6 — решение CFD;
7 — выгрузка температур и измененной геометрии;
8 — мапирование температур и геометрии на сетку Emag;
9 — применение температур и построение геометрии на стороне Emag решателя;
10 — $\tau_T \geqslant \tau_k$; 11 — нет; 12 — да; 13 — конец

структурированная гексосетка, далее присваиваем нужные свойства заготовке и воздуху, загружаем полученные объёмные силы $F(x, y)$ и объёмную мощность тепловыделения q_V, выбираем необходимую модель решателя, после чего решаем теплогидродинамическую задачу.

6. Выгружаем температуру и объёмную долю $\beta(x, y)$ заготовки, полученные при решении теплогидродинамической задачи.

7. Мапируем выгруженные температуру и объёмную долю $\beta(x, y)$ на сетку электромагнитной части.

8. Применяем мапированные температуру и объёмную долю $\beta(x, y)$ на стороне Emag решателя.

9. Повторяем цикл с первого пункта, пока текущее время не будет превышать конченое.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ

В ходе решения электромагнитной задачи были получены распределения плотности тока в расплаве, магнитной индукции и сил Лоренца. На рис. 4 приведено распределение силы Ампера.

В ходе решения теплогидродинамической задачи были получены температурное поле в расплаве, распределение Джоулева тепла, доля жидкой фазы алюминия в момент плавления и поле скоростей в расплаве. На рис. 5–7 представлены температура в процессе нагрева заготовки, распределение Джоулева тепла, доля жидкой фазы алюминия в момент плавки, соответственно.

На рис. 8 показано изменение формы свободной поверхности в расплаве с течением времени.

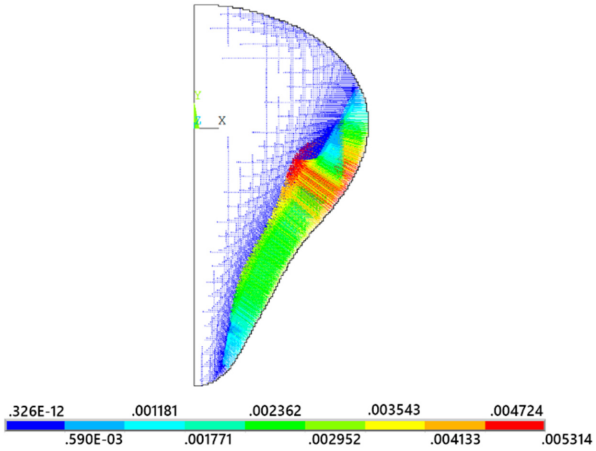


Рис. 4. Распределение силы Ампера на 98 секунде

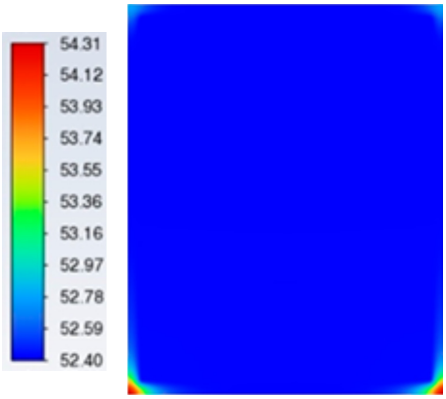


Рис. 5. Температура в начале нагрева

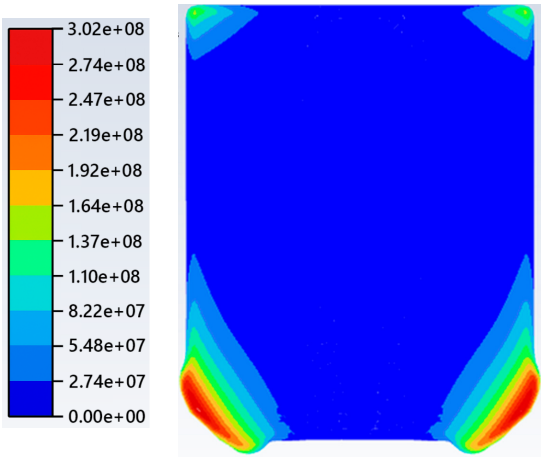


Рис. 6. Распределение Джоулева тепла

На рис. 9 отображены результаты аналогичного исследования команды учёных в составе С. Спитанса, Э. Бааке, Б. Наке и А. Яковича.

Проанализировав распределения, представленные на рис. 4–8, которые были получены при решении МГД задачи, можно заметить, что форма свободной поверхности, поле скоростей в расплаве, сила Лоренца, поддерживающая расплав в воздухе, хорошо коррелируют с данными, полученными в работах [2, 3, 6], и изображёнными на рис. 9.

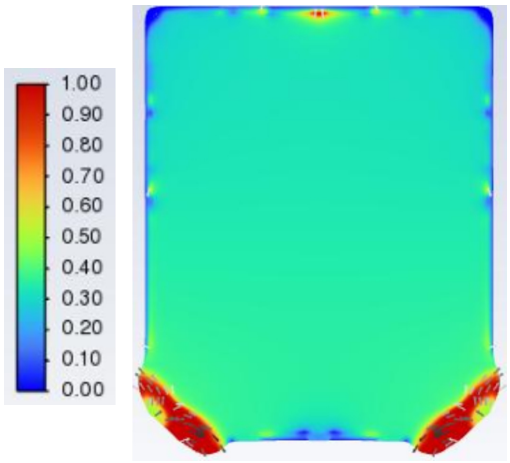


Рис. 7. Доля жидкой фазы алюминия в процессе плавления

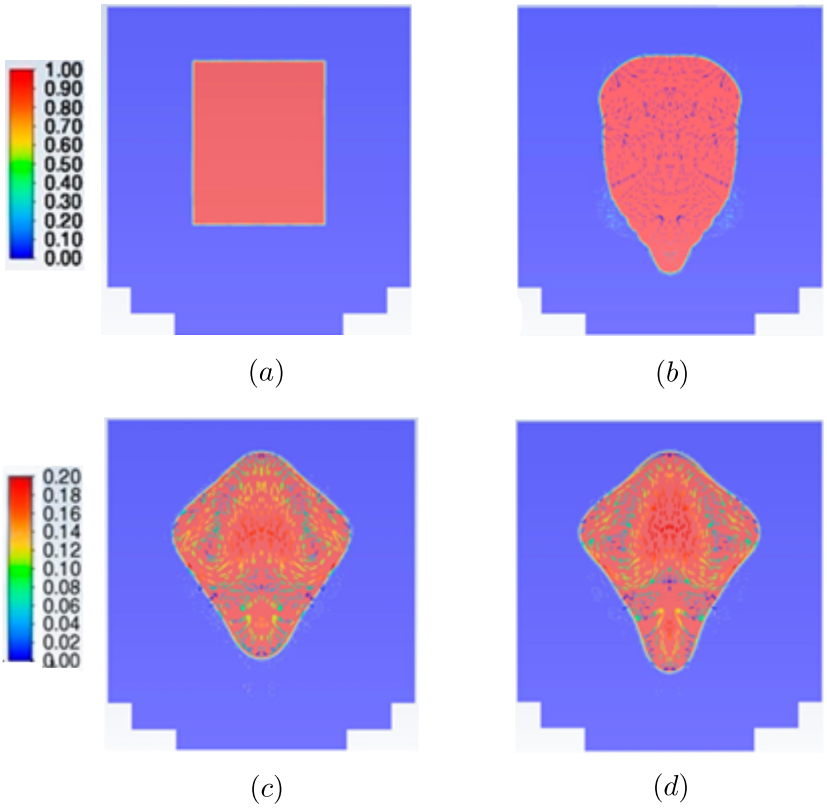


Рис. 8. Форма свободной поверхности с течением времени:
(a) 0 с; (b) 56 с; (c) 69 с; (d) 76 с

В ходе проведённого исследования изучалась зависимость процесса плавления металлической заготовки от величины тока в индукторе. В рамках численного моделирования фиксировались время полного плавления заготовки, максимальная температура, достигаемая в ходе нагрева, а также потребляемая мощность. Численное моделирование проводилось при различных значениях тока, что позволило построить зависимости исследуемых параметров от силы тока.

На рис. 10 продемонстрирована температурная зависимость от времени плавления и величины тока.

Наблюдается обратная зависимость: с увеличением силы тока время плавления умень-

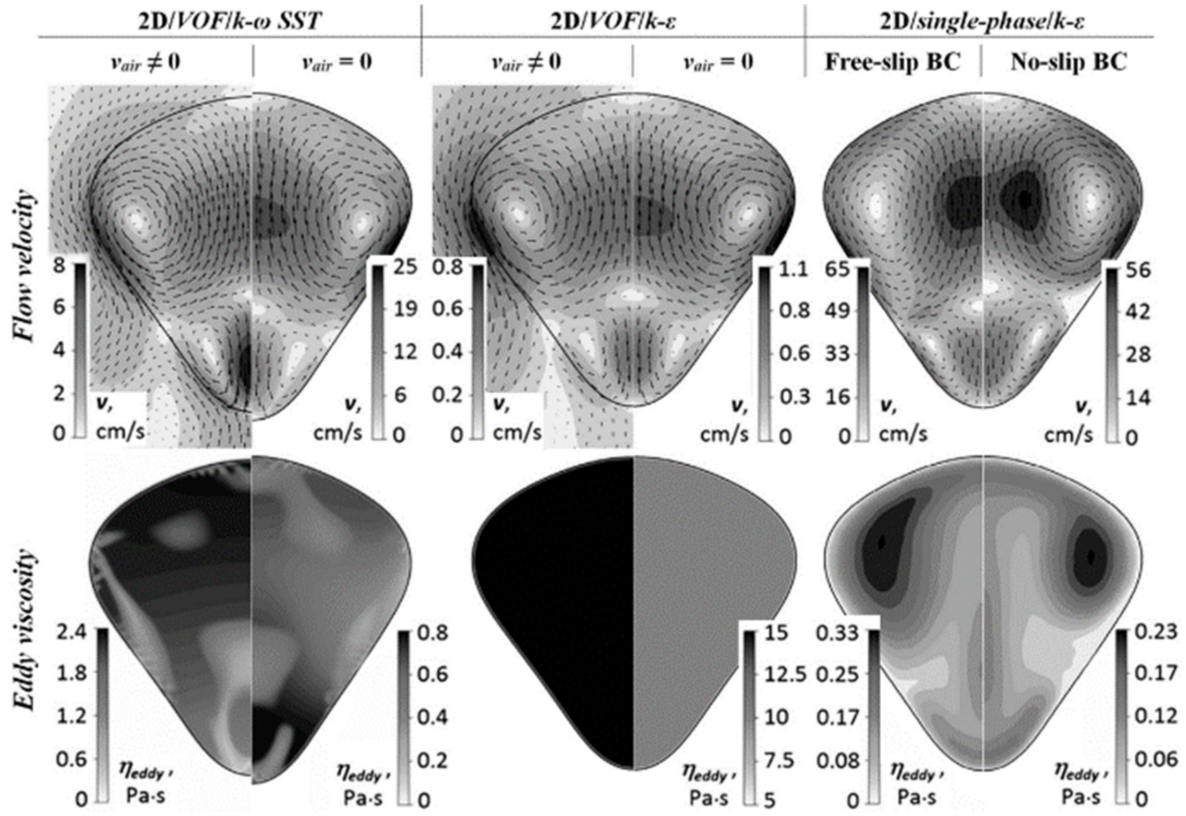


Рис. 9. Результаты исследования команды Спитанса, Бааке, Наке и Яковича [3]

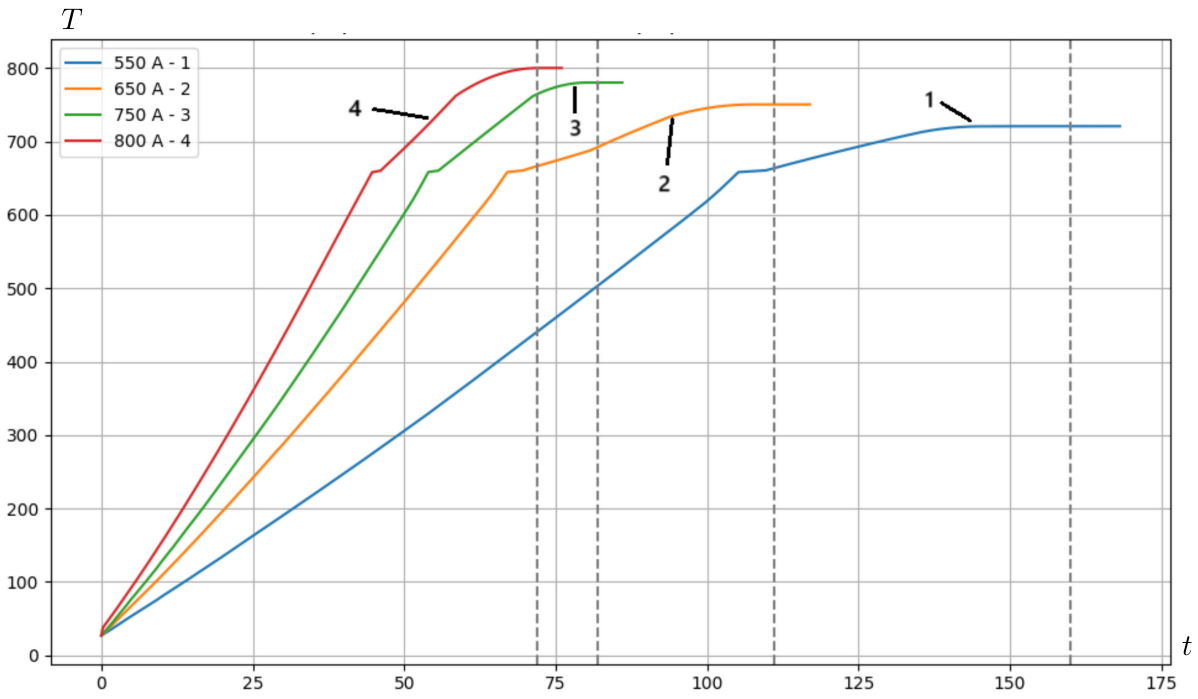


Рис. 10. Температурная зависимость от времени и тока

шается. Это связано с тем, что при большем токе возрастает количество выделяемого тепла, согласно закону Джоуля — Ленца, что ускоряет процесс нагревания и, соответственно, плавления материала.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты численного моделирования протестированы посредством сравнения с экспериментальными данными, представленными в [3], показавшим хорошую корреляцию формы свободной поверхности, поля скоростей в расплаве, силы Лоренца. В результате работы:

1. Разработан алгоритм сопряжения электромагнитной и теплогидродинамической задачи, который может быть реализован в программном комплексе ANSYS для решения связанной МГД задачи и анализа процессов.

2. Разработан программный комплекс для решения сопряжённых МГД задач на базе коммерческого пакета Ansys в 2D.

3. Разработана численная 2D модель в программном комплексе ANSYS для расчёта электромагнитных процессов и интегральных энергетических параметров в индукционной установке для левитационной плавки алюминиевой заготовки весом 18,6 г.

4. Разработана численная 2D модель в программном комплексе ANSYS для расчёта теплогидродинамических процессов и динамики формы свободной поверхности в установке для левитационной плавки алюминиевой заготовки весом 18,6 г.

5. Произведено тестирование и валидация программного комплекса для решения сопряжённой МГД задачи.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Данная работа финансировалась за счёт средств бюджета Новосибирского государственного технического университета. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

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

ЛИТЕРАТУРА

1. *Сизганов Н.В., Хацаюк М.Ю., Тимофеев В.Н.* Численное моделирование процессов магнитной гидродинамики на базе открытого программного обеспечения (OpenFOAM/EOF/Elmer). Красноярск: изд-во СФУ, 2021.
2. *Bakhtiyarov S.I., Siginer D.A.* Electromagnetic Levitation Part I // Theoretical and Experimental Considerations FDMP. 2008. V. 4, N 2. P. 99–112.
3. *Spitans S., Baake E., Nacke B., Jakovics A.* Numerical Modeling of Free Surface Dynamics of Melt in an Alternate Electromagnetic Field. Part II // Conventional Electromagnetic Levitation Metallurgical and Materials Transactions B. 2016. V. 47.
4. *Хацаюк М.Ю.* Теория и моделирование магнитогидродинамических процессов в электротехнологических комплексах металлургического назначения. Санкт-Петербург: Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет «ЛЭТИ». Дис. докт. по ВАК РФ 05.09.10.
5. *Морев А.Э., Максимов А.М.* Комплекс для импорта формы свободной поверхности и поля температур при исследовании сопряжённых МГД-процессов // НГТУ, Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2024618450 от 12.04.2025.
6. *Dzelme V.* Liquid metal electromagnetic levitation. Numerical modelling using Elmer and OpenFOAM // MHD Modelling School 2019, University of Latvia Faculty, of Physics, Mathematics and Optometry Laboratory for Mathematical Modelling of Environmental and Technological Processes, 2019.
7. *Демирчян К.С.* Машинные расчеты электромагнитных полей. М.: Высш. школа, 1986
8. *Каплун А.Б., Морозов Е.М., Олферьева М.А.* ANSYS в руках инженера. М.: УРСС, 2003.
9. *Темам Р.* Уравнения Навье — Стокса. Теория и численный анализ. М.: Мир, 1981.

10. *Ferziger J.H.* Numerical Simulation of Large Eddies for the Computation of Turbulent Flows // Rocket Science and Cosmonautics. 1977. V. 15, N. 9. P. 56–65.
11. *Smirnov E.M., Zaitsev D.K.* Finite Volume Method Applied to Hydrodynamics and Heat Transfer Problems in Complex Geometries // Scientific and Technical Bulletin. 2004. N. 2. P. 70–81.
12. *Bojarevics V., Pericleous K.* Modelling electromagnetically levitated liquid droplet oscillations // ISIJ International. 2003. N 6. P. 890–898.
13. *Bojarevics V., Pericleous K.* Modeling the dynamics of magnetic semi-levitation melting // Metall. Mater. Trans. B. 2000. N 31B. P. 179–189.
14. *Incropera F.P., DeWitt D.P., Bergman T.L., Lavine A.S.* Fundamentals of Heat Transfer. M.: Binom-Press LLC, 2007.
15. *Alexiades V., Solomon A.D.* Mathematical Modeling of Melting and Freezing Processes. Hemisphere Publishing Corporation, 1993.
16. ANSYS Fluent User's Guide, Ansys Inc., 2024. https://ansyshelp.ansys.com

SIBERIAN JOURNAL OF INDUSTRIAL MATHEMATICS

UDC 621.365.5:669

MODELING OF ELECTROMAGNETIC, THERMAL, AND HYDRODYNAMIC PROCESSES DURING LEVITATIONAL HEATING OF ALUMINUM PRODUCTS

© 2026 M. N. Andreev[a], A. E. Morev[b]

Novosibirsk State Technical University,
K. Marks prosp., 20, Novosibirsk 630073, Russia

E-mails: [a]andreev.maxim.1998@yandex.ru, [b]glhficcup@yandex.ru

Received 10.09.2025, revised 15.12.2025, accepted 13.05.2026

Abstract. Magnetohydrodynamic (MHD) technologies are extensively applied in the production of aluminum alloys. They enable effective mixing of the melt, enhance purification processes, and ensure uniformity in both temperature distribution and chemical composition. Growing demand for specialized aluminum alloys imposes stricter requirements on their quality and performance, stimulating the creation of new MHD equipment as well as the refinement of existing systems and processes. A key benefit of levitation melting is the elimination of melt contamination by crucible materials or other substances, which typically occurs when the melt comes into contact with them in conventional methods. This study focuses on analyzing electromagnetic and hydrodynamic phenomena within an induction system designed for levitation melting of aluminum billets. The paper reviews established numerical modeling approaches for such problems, emphasizing their distinctive feature – the need to account for interactions between different physical fields. Because of this complexity and narrow specialization, modeling is often constrained by available software tools. Comprehensive investigation of these processes requires the integration of electromagnetic and hydrodynamic methods. The paper also presents results of numerical simulations for an MHD problem with feedback, carried out using an original program developed for field quantity interpolation.

Keywords: alternating electromagnetic field, magnetic hydrodynamics, thermodynamics, levitation melting, control volume method, multiphysics.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.302

REFERENCES

1. N.V. Sizganov, M.Yu. Khatsayuk, V.N. Timofeev. Chislennoe modelirovanie processov magnitnoj gidrodinamiki na baze otkrytogo programmnogo obespecheniya (OpenFOAM/EOF/Elmer) [Numerical Simulation of Magnetohydrodynamic Processes Using Open-Source Software (OpenFOAM/EOF/Elmer)]. Krasnoyarsk: Siberian Federal University, 2021 (in Russian).
2. Bakhtiyarov S.I., Siginer D.A. Electromagnetic Levitation Part I. *Theoretical and Experimental Considerations FDMP*, 2008, Vol.4, No. 2, pp.99–112.
3. Spitans S., Baake E., Nacke B., Jakovics A. Numerical Modeling of Free Surface Dynamics of Melt in an Alternate Electromagnetic Field. Part II. *Conventional Electromagnetic Levitation Metallurgical and Materials Transactions B*, 2016, Vol. 47.
4. M.Yu. Khatsayuk. Teoriya i modelirovanie magnitogidrodinamicheskih processov v ehlektrotehnologicheskih kompleksah metallurgicheskogo naznacheniya [Theory and modeling of magnetohydrodynamic processes in electrotechnological complexes for metallurgical purposes]. Dis Dr. Tech. Sciences: 05.09.10. St. Petersburg: St. Petersburg Electrotechnical University «LETI». 2019.

English translation is published in Journal of Applied and Industrial Mathematics, 2026, Vol. 20, No. 3.

5. A.E. Morev, M.N. Andreev. Complex for Importing Free Surface Shape and Temperature Field in the Study of Coupled MHD Processes, Patent No. 2024618450, filed 12.04.2024, published 12.04.2024, Russia.
6. Dzelme V. Liquid metal electromagnetic levitation. Numerical modelling using Elmer and OpenFOAM. *MHD Modelling School 2019, University of Latvia Faculty, of Physics, Mathematics and Optometry Laboratory for Mathematical Modelling of Environmental and Technological Processes*, 2019.
7. Демирчян К.С. Mashinnye raschety ehlektromagnitnyh polej [Numerical Calculations of Electromagnetic Fields]. Moscow: Vysshaya Shkola, 1986 (in Russian).
8. Kaplun A.B., Morozov E.M., Olferyeva M.A. ANSYS v rukah inzhenera [ANSYS in the Hands of an Engineer] Moscow: Publ. URSS, 2003 (in Russian).
9. Temam R. Navier—Stokes Equations: Theory and Numerical Analysis. North-Holland Publ. Company, 1977.
10. Ferziger J.H. Numerical Simulation of Large Eddies for the Computation of Turbulent Flows. *Rocket Science and Cosmonautics*, 1977, Vol. 15, No. 9, pp. 56–65.
11. Smirnov E.M., Zaitsev D.K. Finite Volume Method Applied to Hydrodynamics and Heat Transfer Problems in Complex Geometries. *Scientific and Technical Bulletin*, 2004, No. 2, pp. 70–81.
12. Bojarevics V., Pericleous K. Modelling electromagnetically levitated liquid droplet oscillations. *ISIJ International*, 2003, No. 6, pp. 890–898.
13. Bojarevics V., Pericleous K. Modeling the dynamics of magnetic semi-levitation melting, *Metall. Mater. Trans. B.*, 2000, Np. 31B, pp. 179–189.
14. Incropera F.P., DeWitt D.P., Bergman T.L., Lavine A.S. Fundamentals of Heat Transfer. M.: Binom-Press LLC, 2007.
15. Alexiades V., Solomon A.D. Mathematical Modeling of Melting and Freezing Processes. Hemisphere Publishing Corporation, 1993.
16. ANSYS Fluent User's Guide, Ansys Inc., 2024. https://ansyshelp.ansys.com

УДК 575.827.2:575.857:51–76

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ЭВОЛЮЦИИ ГРУППИРОВАНИЯ ЖИВОТНЫХ

© 2026 А. В. Епифанов

Южный Федеральный Университет,
ул. Большая Садовая, 105/42, г. Ростов-на-Дону 344006, Россия

E-mail: epifanov-av@yandex.ru

Поступила в редакцию 17.10.2025 г.; после доработки 30.08.2026 г.;
принята к публикации 14.10.2026 г.

Исследуется механизм группирования организмов, популяция которых обладает эффектом Олли. С этой целью рассматривается математическая модель эволюции миграции в однородной среде особей, являющихся жертвой хищничества. Найдены условия на параметры, при которых симметричная миграционная стратегия является эволюционно притягивающей. Когда в окрестности устойчивого равновесия приспособленность возрастает с увеличением плотности популяции, эволюция может вести к группированию особей, даже если исходная миграция близка к симметричной. Определено критическое значение скорости миграции хищника, при переходе через которое эволюционное притяжение симметричной миграционной стратегии жертвы сменяется эволюционным отталкиванием.

Ключевые слова: адаптивная динамика, эволюция миграции, хищник — жертва, коллективное поведение животных, эффект Олли.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.303

ВВЕДЕНИЕ

В математической экологии важным является вопрос, каким образом вид распределяется по ареалу. Одной из теорий, предсказывающих это распределение, является теория идеального свободного распределения (ИСР) [1–4]. Данная теория утверждает, что при выполнении определённых условий особи должны распределяться таким образом, чтобы максимизировать свою приспособленность, и распределение популяции должно быть пропорционально распределению ресурса. В теории ИСР предполагается, что приспособленность особей убывает с ростом плотности популяции [1]. С другой стороны особи могут иметь трудности с нахождением пары при низкой плотности или участвовать в социальном поведении, таком как охота или защита в группах, в связи с чем относительная скорость роста популяции может возрастать с ростом её плотности. Данное явление получило название эффекта Олли [5]. В этой связи интерес представляет вопрос, каким образом вид распределяется по ареалу, если приспособленность составляющих его особей может возрастать с ростом плотности. Различают слабый и сильный эффект Олли [5, 6]. При сильном эффекте Олли скорость роста популяции при малой плотности отрицательна, и вид вымирает.

Одним из факторов, определяющих распределение вида по ареалу, является эволюция его миграции, которая исследовалась, например, в работах [7–9], см. также обзор [10]. В статьях [2, 4] исследовалось, является ли миграционная стратегия ИСР эволюционно стабильной и эволюционно притягивающей (convergence stable).

В природе животные многих видов собираются в стада или стаи. Представляется, что если популяция обладает эффектом Олли, то особи, объединяющиеся в группы, должны иметь преимущество от нахождения в группе и более высокую приспособленность. Таким образом

такое поведение группирования должно быть распространённым. Эволюция миграции популяции, обладающей эффектом Олли, исследовалась в работах [11–14]. Перечисленные работы, посвящённые исследованию эволюции миграции, рассматривают изолированный вид. В то же время экологические взаимодействия могут создавать движущие эволюцию силы отбора. Распределение видов по ареалу, в том числе, идеальное свободное распределение, и влияние миграции на взаимодействие видов исследовались, например, в работах [15–19], где рассматривались системы дифференциальных уравнений в частных производных, и были получены результаты по семействам решений. В настоящей работе рассматривается дискретный вариант распределённого сообщества (два местообитания) и исследуется эволюция миграции популяции, обладающей эффектом Олли и находящейся под давлением отбора со стороны хищника.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим следующую модификацию модели Базыкина [20], в которой миграция жертв задаётся коэффициентами m_1, n и ε:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_1[(x_1+c)(1-x_1)-ay_1]+\varepsilon(m_1x_2-nx_1),\\ \dot{x}_2 &= x_2[(x_2+c)(1-x_2)-ay_2]-\varepsilon(m_1x_2-nx_1),\\ \dot{y}_1 &= y_1(-d+bx_1-y_1)+\varepsilon m(y_2-y_1),\\ \dot{y}_2 &= y_2(-d+bx_2-y_2)-\varepsilon m(y_2-y_1). \end{aligned} \tag{1}$$

Здесь x_i — численность особей жертвы в i-м местообитании, y_i — численность хищника в i-м местообитании, все параметры неотрицательные, $c<1$.

Исследуем эволюцию миграции популяции жертв, а точнее попытаемся дать ответ на вопрос, при каких условиях эволюция ведёт к группированию жертв. Под группированием будем понимать неоднородное распределение вида по однородному ареалу. Будем считать, что эволюция миграции происходит за счёт изменения значения параметра m_1, а значение параметра n будем считать постоянным.

Для исследования эволюции миграции применим подход, известный под названием «адаптивная динамика» [21]. В этом подходе рассматриваются последовательные инвазии мутантных популяций в среду, условия которой задаются резидентной популяцией и другими взаимодействующими видами, и предполагается, что мутации достаточно редки, так что можно считать, что когда произошла мутация, то до следующей мутации система успевает прийти к установлению к некоторому аттрактору. Также предполагается, что стратегия мутанта близка к стратегии резидентной популяции. Если мутантная популяция вытесняет резидентную популяцию, то она становится новой резидентной популяцией и далее можно рассматривать инвазию новой мутантной популяции.

Инвазия мутанта, миграция которого определяется параметрами m_2, близким к m_1, n и ε, в популяцию обычных особей, описывается следующей системой:

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_1[(x_1+z_1+c)(1-x_1-z_1)-ay_1]+\varepsilon(m_1x_2-nx_1),\\ \dot{x}_2 &= x_2[(x_2+z_2+c)(1-x_2-z_2)-ay_2]-\varepsilon(m_1x_2-nx_1),\\ \dot{y}_1 &= y_1[-d+b(x_1+z_1)-y_1]+\varepsilon m(y_2-y_1),\\ \dot{y}_2 &= y_2[-d+b(x_2+z_2)-y_2]-\varepsilon m(y_2-y_1),\\ \dot{z}_1 &= z_1[(x_1+z_1+c)(1-x_1-z_1)-ay_1]+\varepsilon(m_2z_2-nz_1),\\ \dot{z}_2 &= z_2[(x_2+z_2+c)(1-x_2-z_2)-ay_2]-\varepsilon(m_2z_2-nz_1). \end{aligned} \tag{2}$$

Здесь z_i — численность мутантных особей жертвы в i-м местообитании, все параметры неотрицательные. Если мутанты вытесняют обычных особей, то это значит, что произошёл шаг

эволюции: значение параметра m_1 стало равно m_2. Отметим, что данная модель предполагает, что размножение бесполое, и поэтому она учитывает только эффект Олли, вызываемый тем, что особи участвуют в некотором социальном поведении, таком как защита или охота в группах, поэтому приспособленность мутантных особей в точке равна $(x_i + z_i + c)(1 - x_i - z_i)$, а не $(z_i + c)(1 - x_i - z_i)$.

2. ЭВОЛЮЦИОННО СИНГУЛЯРНЫЕ И ЭВОЛЮЦИОННО СТАБИЛЬНЫЕ СТРАТЕГИИ

Рассмотрим систему

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}} &= \mathbf{F}(\xi, \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})\mathbf{x}, \\ \dot{\mathbf{y}} &= \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}), \\ \dot{\mathbf{z}} &= \mathbf{F}(\eta, \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z})\mathbf{z}, \end{aligned} \tag{3}$$

где $\mathbf{x}$, $\mathbf{z} \in \mathbb{R}^m$ — векторы плотностей структурированных резидентной и происходящей от неё мутантной популяций рассматриваемого вида, соответственно, $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ — вектор плотностей других видов сообщества,

$$\mathbf{F}(\xi, \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = (f_{ij}(\xi, \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}))_{i,j=1}^{m}, \quad \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}) = (g_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}), \ldots, g_n(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}))^T,$$

ξ и η — стратегии резидентной и мутантной популяций, и асимптотически устойчивое равновесие $(\mathbf{x}^*(\xi), \mathbf{y}^*(\xi))$ системы

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}} &= \mathbf{F}(\xi, \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{0})\mathbf{x}, \\ \dot{\mathbf{y}} &= \mathbf{g}(\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{0}), \end{aligned} \tag{4}$$

такое что $\mathbf{x}^*(\xi)$, $\mathbf{y}^*(\xi) \geqslant 0$, $\mathbf{x}^*(\xi) \cdot \mathbf{1} > 0$, а также рассмотрим следующую задачу на собственные значения:

$$\sigma\boldsymbol{\psi} = \mathbf{F}(\eta, \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{0})\boldsymbol{\psi}. \tag{5}$$

Определение 1. Величина $\dfrac{\partial\sigma}{\partial\eta}|_{\eta=\xi}$, где σ — главное собственное значение задачи (5) называется градиентом отбора.

Определение 2. Стратегия $\overline{\xi}$ называется эволюционно сингулярной относительно равновесия $(\mathbf{x}^*(\overline{\xi}), \mathbf{y}^*(\overline{\xi}))$, если

$$\frac{\partial\sigma}{\partial\eta}|_{\eta=\overline{\xi}} = 0. \tag{6}$$

Для задачи (2) $m = n = 2$, $\xi = m_1$, $\eta = m_2$,

$$\begin{gathered} f_{11} = (x_1 + z_1 + c)(1 - x_1 - z_1) - ay_1 - \varepsilon n, \quad f_{12} = \varepsilon m_1, \quad f_{21} = \varepsilon n, \\ f_{22} = (x_2 + z_2 + c)(1 - x_2 - z_2) - ay_2 - \varepsilon m_1, \quad g_1 = y_1[-d + b(x_1 + z_1) - y_1] + \varepsilon m(y_2 - y_1), \\ g_2 = y_2[-d + b(x_2 + z_2) - y_2] - \varepsilon m(y_2 - y_1), \quad \sigma = \lambda, \end{gathered}$$

где λ — это главное собственное значение задачи

$$\begin{aligned} \lambda\phi_1 &= [(x_1^* + c)(1 - x_1^*) - ay_1^* - \varepsilon n]\phi_1 + \varepsilon m_2\phi_2, \\ \lambda\phi_2 &= \varepsilon n\phi_1 + [(x_2^* + c)(1 - x_2^*) - ay_2^* - \varepsilon m_2]\phi_2, \end{aligned} \tag{7}$$

а $(x_1^*, x_2^*, y_1^*, y_2^*)$ является решением системы

$$\begin{aligned} x_1[(x_1+c)(1-x_1)-ay_1]+\varepsilon(m_1x_2-nx_1)=0,\\ x_2[(x_2+c)(1-x_2)-ay_2]-\varepsilon(m_1x_2-nx_1)=0,\\ y_1(-d+bx_1-y_1)+\varepsilon m(y_2-y_1)=0,\\ y_2(-d+bx_2-y_2)-\varepsilon m(y_2-y_1)=0, \end{aligned} \tag{8}$$

таким что $x_i^*,\ y_i^* \geqslant 0$ и $x_1^*+x_2^*>0,\ y_1^*+y_2^*>0$.

Продифференцируем задачу на собственные значения (7) по параметру m_2 при $m_2=m_1$, учитывая, что при $m_2=m_1$ главное собственное значение $\lambda=0$, а соответствующий ему собственный вектор $(\phi_1,\phi_2)=(x_1^*,x_2^*)$

$$\begin{aligned} \mu x_1^* &= [(x_1^*+c)(1-x_1^*)-ay_1^*-\varepsilon n]\mu_1+\varepsilon m_1\mu_2+\varepsilon x_2^*,\\ \mu x_2^* &= \varepsilon n\mu_1+[(x_2^*+c)(1-x_2^*)-ay_2^*-\varepsilon m_1]\mu_2-\varepsilon x_2^*, \end{aligned} \tag{9}$$

где

$$\mu=\left.\frac{\partial\lambda}{\partial m_2}\right|_{m_2=m_1},\quad \mu_i=\left.\frac{\partial\phi_i}{\partial m_2}\right|_{m_2=m_1},\quad i=1,2.$$

Умножив первое уравнение (9) на nx_1^*, второе уравнение (9) на $m_1x_2^*$, сложив их и вычтя из полученной суммы первое уравнение (8) при $x_1=x_1^*$ и $x_2=x_2^*$, умноженное на $n\mu_1$, и второе уравнение (8) при $x_1=x_1^*$ и $x_2=x_2^*$, умноженное на $m_1\mu_2$, получим следующее уравнение для определения μ:

$$\mu=\frac{(nx_1^*-m_1x_2^*)\varepsilon x_2^*}{nx_1^{*2}+m_1x_2^{*2}} \tag{10}$$

Таким образом, стратегия является эволюционно сингулярной тогда и только тогда, когда

$$\frac{(nx_1^*-m_1x_2^*)x_2^*}{nx_1^{*2}+m_1x_2^{*2}}=0.$$

Если выполнены условия (A6)–(A8), то стратегия $m_1=n$ является эволюционно сингулярной относительно равновесия (x^*,x^*,y^*,y^*).

Стратегия называется эволюционно стабильной, если когда все особи в популяции используют эту стратегию, невозможна инвазия никакой другой стратегии [22].

Утверждение 1. Стратегия $m_1=0$ является эволюционно стабильной стратегией относительно равновесия $(0,x_2^*,y_1^*,y_2^*)$, $x_2^*,y_i^*>0$, если это равновесие является асимптотически устойчивым и $y_1^*>\dfrac{c}{a}$.

Доказательство. Складывая уравнения (7) и учитывая, что из условий $m_1=0$, $x_1^*=0$ и $x_2^*>0$ следует $(x_2^*+c)(1-x_2^*)-ay_2^*=0$, получаем

$$\lambda=\frac{c-ay_1^*}{\phi_1+\phi_2}\phi_1<0,$$

откуда и следует невозможность инвазии никакой другой стратегии. □

3. ЭВОЛЮЦИОННО ПРИТЯГИВАЮЩИЕ СТРАТЕГИИ

Определение 3.[9] Стратегия $\overline{\xi}$, эволюционно сингулярная относительно равновесия $(\mathbf{x}^*(\overline{\xi}), \mathbf{y}^*(\overline{\xi}))$, называется эволюционно притягивающей (convergence stable strategy) для системы (4), если существует $\delta > 0$, такое что

$$\operatorname{sign}\sigma = \begin{cases} -1, & \text{если } \overline{\xi} < \xi < \eta < \overline{\xi} + \delta \text{ или } \overline{\xi} - \delta < \eta < \xi < \overline{\xi}, \\ 1, & \text{если } \overline{\xi} < \eta < \xi < \overline{\xi} + \delta \text{ или } \overline{\xi} - \delta < \xi < \eta < \overline{\xi}, \end{cases}$$

где σ — главное собственное значение задачи (5).

По аналогии можно также дать определение эволюционно отталкивающей стратегии.

Определение 4. Стратегия $\overline{\xi}$, эволюционно сингулярная относительно равновесия $(\mathbf{x}^*(\overline{\xi}), \mathbf{y}^*(\overline{\xi}))$, называется эволюционно отталкивающей для системы (4), если существует $\delta > 0$, такое что

$$\operatorname{sign}\sigma = \begin{cases} 1, & \text{если } \overline{\xi} < \xi < \eta < \overline{\xi} + \delta \text{ или } \overline{\xi} - \delta < \eta < \xi < \overline{\xi}, \\ -1, & \text{если } \overline{\xi} < \eta < \xi < \overline{\xi} + \delta \text{ или } \overline{\xi} - \delta < \xi < \eta < \overline{\xi}. \end{cases}$$

Существует так называемый принцип «инвазия означает вытеснение»: если инвазия мутатной популяцией со стратегией, близкой к стратегии резидентной популяции, успешна, то мутантная популяция вытесняет резидентную. Пусть ξ — стратегия, для которой система без мутанта (4) имеет гиперболически устойчивое равновесие (т. е. все собственные значения имеют отрицательные вещественные части), в котором находится система, а η — достаточно близкая к ξ стратегия мутантной популяции.

В этом разделе предполагается, что для таких не эволюционно сингулярной стратегии ξ и стратегии η принцип «инвазия означает вытеснение» выполняется. В статье [23] доказано, что этот принцип выполняется для стратегий ξ, для которых градиент отбора

$$S(\xi) = \sum_{i,j=1}^{m} \frac{\alpha_i^*}{x_i^*} \frac{\partial f_{ij}(\xi, \mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0})}{\partial \xi} x_j^* \tag{11}$$

не равен нулю, где $\boldsymbol{\alpha}^*$, $\mathbf{x}^*$ являются решениями системы

$$\begin{gathered} \boldsymbol{\alpha}^* \mathbf{F}^{pc}(\xi, \mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*) = \mathbf{0}, \quad \mathbf{F}^{pc}(\xi, \mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*)\mathbf{p}^* = \mathbf{0}, \quad \mathbf{F}(\xi, \mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0})\mathbf{x}^* = \mathbf{0}, \\ \mathbf{g}(\mathbf{x}^*, \mathbf{y}^*, \mathbf{0}) = \mathbf{0}, \quad \sum_{i=1}^{m} \alpha_i^* = 1, \end{gathered} \tag{12}$$

где

$$F_{ij}^{pc} = \begin{cases} \dfrac{x_j}{x_i} f_{ij}(\xi, \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{0}), & j \neq i \\ -\sum\limits_{k \neq i} \dfrac{x_k}{x_i} f_{ik}(\xi, \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{0}), & j = i. \end{cases}$$

Покажем, что для системы (2) выражения (10) и (11) для градиента отбора совпадают, что будет значить, что сделанное предположение о выполнении принципа «инвазия означает вытеснение» для стратегии мутантной популяции, достаточно близкой к не эволюционно сингулярной стратегии резидентной популяции, верно. Для системы (2) система (12) имеет

вид

$$\varepsilon[n(1-\alpha^*)\frac{x_1^*}{x_2^*} - m_1\alpha^*\frac{x_2^*}{x_1^*}] = 0,$$
$$\frac{x_2^*}{x_1^*}\varepsilon m_1(p_2^* - p_1^*) = 0,$$
$$\frac{x_1^*}{x_2^*}\varepsilon n(p_1^* - p_2^*) = 0,$$
$$x_1^*[(x_1^*+c)(1-x_1^*) - ay_1^*] + \varepsilon(m_1x_2^* - nx_1^*) = 0,$$
$$x_2^*[(x_2^*+c)(1-x_2^*) - ay_2^*] - \varepsilon(m_1x_2^* - nx_1^*) = 0,$$
$$y_1^*(-d + bx_1^* - y_1^*) + \varepsilon m(y_2^* - y_1^*) = 0,$$
$$y_2^*(-d + bx_2^* - y_2^*) - \varepsilon m(y_2^* - y_1^*) = 0,$$

и

$$S(\xi) = S(m_1) = \frac{(nx_1^* - m_1x_2^*)\varepsilon x_2^*}{nx_1^{*2} + m_1x_2^{*2}} = \mu.$$

Отметим, что в [24] анализировалось выполнение принципа «инвазия означает вытеснение» для неструктурированной популяции, а в [25] — для бесконечномерной модели.

Определение эволюционно притягивающей стратегии можно очевидным образом расширить на эволюционно стабильные стратегии, находящиеся на границе рассматриваемого пространства стратегий.

Утверждение 2. Стратегия $m_1 = 0$, эволюционно стабильная относительно равновесия $(0, x_2^*, y_1^*, y_2^*)$, $x_2^*, y_i^* > 0$, является эволюционно притягивающей, если это равновесие является гиперболически устойчивым и $y_1^* > \frac{c}{a}$.

Доказательство. Если записать систему (1) в виде

$$\dot{\mathbf{z}} = \mathbf{H}(\mathbf{z}) + m_1\mathbf{M}(\mathbf{z}), \tag{13}$$

где $\mathbf{z} = (x_1, x_2, y_1, y_2)^T$, $\mathbf{M}(\mathbf{z}) = \varepsilon(x_2, -x_2, 0, 0)^T$,

$$\mathbf{H}(\mathbf{z}) = (x_1[(x_1+c)(1-x_1) - ay_1] - \varepsilon nx_1, x_2[(x_2+c)(1-x_2) - ay_2] + \varepsilon nx_1,$$
$$y_1(-d - y_1 + bx_1) + \varepsilon m(y_2 - y_1), y_2(-d - y_2 + bx_2) + \varepsilon m(y_1 - y_2))^T,$$

то, так как функции $\mathbf{H}(\mathbf{z})$ и $\mathbf{M}(\mathbf{z})$ гладкие, по теореме о неявной функции при малых $m_1 > 0$ она имеет асимптотически устойчивое равновесие, которое даётся формулой

$$\mathbf{z}^{**} = \mathbf{z}^* - m_1J^{-1}\mathbf{M}(\mathbf{z}^*) + O(m_1^2),$$

где J — матрица Якоби системы (13) при $m_1 = 0$ в равновесии $\mathbf{z}^* = (0, x_2^*, y_1^*, y_2^*)$ [26] и

$$j_{11}^{-1} = \frac{1}{c - ay_1^* - \varepsilon n}, \quad j_{1j}^{-1} = 0, \quad j \neq 1,$$

j_{ij}^{-1} — ij-й элемент матрицы J^{-1}.

Тогда при малом $m_1 > 0$

$$x_1^{**} = -\frac{\varepsilon m_1x_2^*}{c - ay_1^* - \varepsilon n} > 0,$$

т. е. равновесие $\mathbf{z}^{**}$ положительно, и знак градиента отбора определяется знаком выражения

$$nx_1^{**} - m_1x_2^{**} = \frac{c - ay_1^*}{ay_1^* - c + \varepsilon n}m_1x_2^* + O\big(m_1^2\big),$$

которое отрицательно при малых $m_1 > 0$. Следовательно, стратегия $m_1 = 0$ является эволюционно притягивающей относительно равновесия $\big(0, x_2^*, y_1^*, y_2^*\big)$. □

Эволюционно сингулярная стратегия $m_1 = n$ является эволюционно притягивающей относительно равновесия (x^*, x^*, y^*, y^*), которое получается при $m_1 = n$, тогда и только тогда, когда производная градиента отбора

$$\left.\frac{\partial \mu}{\partial m_1}\right|_{m_1=n} = \varepsilon \frac{n\big(\frac{\partial x_1^*}{\partial m_1} - \frac{\partial x_2^*}{\partial m_1}\big) - x^*}{2nx^*} < 0. \tag{14}$$

Для нахождения производных компонент равновесия по m_1 при $m_1 = n$ продифференцируем по m_1 систему (8). Получается следующая система линейных уравнений с неизвестными $Dx_i^* = \dfrac{\partial}{\partial m_1} x_i^*$ и $Dy_i^* = \dfrac{\partial}{\partial m_1} y_i^*$:

$$\begin{pmatrix} c_{11} & c_{12} & c_{13} & 0 \\ c_{21} & c_{22} & 0 & c_{24} \\ c_{31} & 0 & c_{33} & c_{34} \\ 0 & c_{42} & c_{43} & c_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Dy_1^* \\ Dy_2^* \\ Dx_1^* \\ Dx_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\varepsilon x_2^* \\ \varepsilon x_2^* \end{pmatrix}, \tag{15}$$

где

$$\begin{gathered} c_{11} = -d + bx_1^* - 2y_1^* - \varepsilon m, \quad c_{12} = c_{21} = \varepsilon m, \quad c_{13} = by_1^*, \\ c_{22} = -d + bx_2^* - 2y_2^* - \varepsilon m, \quad c_{24} = by_2^*, \quad c_{31} = -ax_1^*, \\ c_{33} = x_1^*[2(1-c) - 3x_1^*] + c - ay_1^* - \varepsilon n, \quad c_{34} = \varepsilon m_1, \quad c_{42} = -ax_2^*, \quad c_{43} = \varepsilon n, \\ c_{44} = x_2^*[2(1-c) - 3x_2^*] + c - ay_2^* - \varepsilon m_1. \end{gathered}$$

При $m_1 = n$ получается

$$\begin{pmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & 0 \\ d_{21} & d_{22} & 0 & d_{24} \\ d_{31} & 0 & d_{33} & d_{34} \\ 0 & d_{42} & d_{43} & d_{44} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Dy_1^* \\ Dy_2^* \\ Dx_1^* \\ Dx_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -\varepsilon x^* \\ \varepsilon x^* \end{pmatrix}, \tag{16}$$

где

$$\begin{gathered} d_{11} = d_{22} = -y^* - \varepsilon m, \quad d_{12} = d_{21} = \varepsilon m, \quad d_{13} = d_{24} = by^*, \\ d_{31} = d_{42} = -ax^*, \quad d_{33} = d_{44} = x^*(1-c-2x^*) - \varepsilon n, \quad d_{34} = d_{43} = \varepsilon n, \end{gathered} \tag{17}$$

а x^*, y^* — компоненты положительного равновесия системы (A2). Вычитая из первого уравнения второе и из третьего — четвёртое, получаем систему

$$\begin{pmatrix} d_{11} - d_{21} & d_{13} \\ d_{31} & d_{33} - d_{43} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Dy_1^* - Dy_2^* \\ Dx_1^* - Dx_2^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ -2\varepsilon x^* \end{pmatrix}.$$

Таким образом,

$$Dx_1^* - Dx_2^* = \frac{2\varepsilon x^*(y^* + 2\varepsilon m)}{(y^* + 2\varepsilon m)[x^*(2x^* - 1 + c) + 2\varepsilon n] + abx^* y^*}.$$

Подставляя это значение в (14), получаем следующее выражение, знак которого определяет, является ли стратегия $m_1 = n$ эволюционно притягивающей:

$$\frac{\partial \mu}{\partial m_1}|_{m_1=n} = -\frac{x^* \varepsilon F_2}{2nF_1}, \tag{18}$$

где

$$\begin{gathered} F_1 = (y^* + 2\varepsilon m)[x^*(2x^* - 1 + c) + 2\varepsilon n] + abx^* y^*, \\ F_2 = (y^* + 2\varepsilon m)(2x^* - 1 + c) + aby^*. \end{gathered}$$

Утверждение 3. При $x^* \geqslant \dfrac{1-c}{2}$ стратегия $m_1 = n$, эволюционно сингулярная относительно положительного асимптотически устойчивого равновесия (x^*, x^*, y^*, y^*), является эволюционно притягивающей.

Доказательство. Для положительного равновесия с $x^* \geqslant \dfrac{1-c}{2}$, условия (A6)–(A8) выполняются и производная градиента отбора при $m_1 = n$ отрицательна (см. (18)). Следовательно стратегия $m_1 = n$ является эволюционно притягивающей. □

Утверждение 4. При

$$0 \leqslant d < \frac{2ab(1-c) - (c+1)^2}{4a},$$
$$\left(x^* < \frac{1-c}{2}, \quad 2ab - 1 > 0, \quad c < -ab - 1 + \sqrt{ab(ab+4)}\right)$$

существует

$$m^* = \frac{B(B+ab)[2d - b(B - ab + 1 - c)]}{4\varepsilon[(c+1)^2 + 2a(2d - b + bc)]} > 0,$$

где

$$B = \sqrt{(ab + c - 1)^2 + 4(ad + c)},$$

такое что стратегия $m_1 = n$, эволюционно сингулярная относительно равновесия (x^*, x^*, y^*, y^*), является эволюционно притягивающей (эволюционно отталкивающей) тогда и только тогда, когда $m < m^*$ $(m > m^*)$.

Доказательство. Сначала покажем, что существуют значения параметров, при которых $x^* < \dfrac{1-c}{2}$ и условия (A6)–(A8) выполняются. Из формул (A3) и (A6) получается условие

$$\frac{2a-1}{a} x^{*2} + \frac{(a-1)(c-1)}{a} x^* + \frac{c}{a} > 0,$$

которое выполняется, например, при $a > 2$, $b > \dfrac{2}{a-1}$, $c > 0$, так же, как и условие (A7). Что касается условия (A8), то если $m < m^*$ $(F_2 > 0)$, то $F_1 > 0$, если же $m > m^*$ $(F_2 < 0)$, то $F_1 > 0$ при

$$n > x^* \frac{(1 - c - 2x^*)(y^* + 2\varepsilon m) - aby^*}{2\varepsilon(y^* + 2\varepsilon m)}.$$

Покажем, что $m^* > 0$ при $d < \dfrac{2ab(1-c) - (c+1)^2}{4a}$. Множитель $(c+1)^2 + 2a(2d - b + bc)$ знаменателя выражения для m^* меньше нуля при $d < \dfrac{2ab(1-c) - (c+1)^2}{4a}$.

Покажем, что и $2d - b(B - ab + 1 - c) < 0$. Для положительного равновесия (x^*, x^*, y^*, y^*) $d < b$. Из $d < b$ следует, что

$$b^2[(ab + c - 1)^2 + 4(ad + c)] > (2d + ab^2 - b + bc)^2,$$

откуда следует $bB > 2d + ab^2 - b + bc$ или требуемое $2d - b(B - ab + 1 - c) < 0$.

Условие $m < m^*$ $(m > m^*)$ получается непосредственно из условия $F_2 > 0$ $(F_2 < 0)$. □

Таким образом, при $m < m^*$ жертва распределяется по однородному ареалу равномерно, но особи не максимизируют свою приспособленность.

Утверждение 5. При $m_1 \neq n$ и $c > 0$ жертва распределяется по ареалу неоднородно, а именно система (1) диссипативна, ни из каких положительных начальных данных решение не сходится к тривиальному равновесию и для любых x_1, x_2, y_1, y_2, $x_1 + x_2 > 0$

$$x_1(t) \not\equiv x_2(t).$$

Доказательство. Покажем, что система (1) диссипативна. Сложим её первые два уравнения. Получим

$$\dot{x}_1 + \dot{x}_2 \leqslant x_1(x_1 + c)(1 - x_1) + x_2(x_2 + c)(1 - x_2)$$

Оба слагаемых $x_i(x_i + c)(1 - x_i)$ ограничены сверху при $x_i \geqslant 0$, значит существует M, такое что $\dot{x}_1 + \dot{x}_2 < 0$ при $x_1 > M$ или $x_2 > M$ независимо от значения другой переменной, т. е. $\dot{x}_1 + \dot{x}_2 < 0$ при $x_1 + x_2 > 2M$, следовательно,

$$\overline{\lim_{t\to\infty}} x_i \leqslant \overline{\lim_{t\to\infty}} (x_1 + x_2) \leqslant 2M.$$

Рассмотрим функцию

$$W(t) = bx_1(t) + bx_2(t) + ay_1(t) + ay_2(t).$$

$$\begin{aligned}\dot{W} &= b[x_1(x_1 + c)(1 - x_1) + x_2(x_2 + c)(1 - x_2)] - ad[y_1(1 + y_1) + y_2(1 + y_2)] \\ &\leqslant b[x_1(x_1 + c + 1 - 1) + x_2(x_2 + c + 1 - 1)] - ad(y_1 + y_2) \leqslant 4bM(2M + c + 1) - \theta W,\end{aligned}$$

где $\theta = \min\{1, d\}$.

Тогда

$$0 \leqslant W(t) \leqslant W(0)e^{-\theta t} + \frac{4bM(2M + c + 1)}{\theta}$$

и

$$0 \leqslant \lim_{t\to\infty} W(t) \leqslant \frac{4bM(2M + c + 1)}{\theta}.$$

Следовательно, решения системы (1) входят в область

$$\left\{(x_1(t), x_2(t), y_1(t), y_2(t)) \mid 0 \leqslant bx_1(t) + bx_2(t) + ay_1(t) + ay_2(t) \leqslant \frac{4bM(2M + c + 1)}{\theta}\right\}$$

и остаются в ней.

Покажем, что из положительных начальных данных решение не сходится к нулевому равновесию. Матрица Якоби в нулевом равновесии записывается в виде

$$J = \begin{pmatrix} c - \varepsilon n & \varepsilon m_1 & 0 & 0 \\ \varepsilon n & c - \varepsilon m_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -d - \varepsilon m & \varepsilon m \\ 0 & 0 & \varepsilon m & -d - \varepsilon m \end{pmatrix}.$$

Данная матрица Якоби имеет собственные значения

$$\lambda_1 = c > 0, \quad \lambda_2 = c - \varepsilon(m_1 + n), \quad \lambda_3 = -d, \quad \lambda_4 = -d - 2\varepsilon m.$$

Таким образом, тривиальное равновесие неустойчиво. Если

$$c - \varepsilon(m_1 + n) \neq -d \quad \text{и} \quad c - \varepsilon(m_1 + n) \neq -d - 2\varepsilon m,$$

то собственному значению $c-\varepsilon(m_1+n)$ отвечает правый собственный вектор $(1,-1,0,0)^T$, собственному значению $-d$ — собственный вектор $(0,0,1,1)$, а собственному значению $-d-2\varepsilon m$ отвечает собственный вектор $(0,0,1,-1)$. При

$$c-\varepsilon(m_1+n)=-d$$

кратному собственному значению соответствуют правые собственные вектора $(1,-1,C,C)^T$, а при

$$c-\varepsilon(m_1+n)=-d-2\varepsilon m$$

— правые собственные вектора $(1,-1,C,-C)^T$, т. е. во всех случаях устойчивые многообразия не пересекаются с положительным ортантом, что доказывает требуемое.

Наконец, покажем, что при $m_1\neq n$ не может быть решений с $x_1(t)\equiv x_2(t)$. Предположим, что существует отличное от нуля решение, такое что $x_1(t)\equiv x_2(t)\equiv x(t)$. Тогда, вычитая из первого уравнения системы (1) второе, получаем

$$y_2(t)-y_1(t)\equiv\frac{2\varepsilon(n-m_1)}{a}. \tag{19}$$

Теперь вычитая из третьего уравнения системы (1) четвёртое, получаем

$$y_1(t)+y_2(t)=bx(t)-d-2\varepsilon m. \tag{20}$$

При $n>m_1$

$$\dot{y}_1=(y_1-\frac{bx-d}{2}+Q)(\varepsilon m+\varepsilon\frac{n-m_1}{a}+Q)>0,$$

где

$$Q=\frac{\sqrt{a[a(bx-d)^2+8\varepsilon^2m(n-m_1)]}}{2a},$$

т. е. y_1 является функцией Ляпунова, и значит решение с $x_1(t)\equiv x_2(t)$ не имеет предельных точек, что противоречит тому, что система диссипативна. Аналогичный вывод справедлив и для $n<m_1$. Значит при $m_1\neq n$ решений с $x_1(t)\equiv x_2(t)$ быть не может. □

Были проведены численные расчёты, иллюстрирующие эволюционное притяжение/отталкивание симметричной миграционной стратегии жертвы в зависимости от значений параметров и вытеснение мутантной популяцией резидентной. Результаты этих расчётов при $a=2$, $b=1$, $\varepsilon=1$, $n=1$ и для различных значений остальных параметров приведены на рисунках.

На рис. 1 приведены результаты расчётов, иллюстрирующие инвазию мутанта для c=0; d=0,3; в этом случае $m^*\approx 0,72$. На рис. 2 приведены результаты расчётов, иллюстрирующие инвазию мутанта для c=0,1; d=0,2; в этом случае $m^*\approx 0,63$. Таким образом, видно, что при $m<m^*$ мутантная популяция со стратегией, более близкой к $m_1=n$, вытесняет резидентную популяцию, а при $m>m^*$ — наоборот, резидентную популяцию вытесняет мутантная популяция со стратегией, находящейся дальше от $m_1=n$.

При $c=0$, $d=0,2$ положительное равновесие неустойчиво и существует устойчивое периодическое решение. На рис. 3 и рис. 4 показана инвазия мутантной популяции в этом случае соответственно при m=0,2; m_1=1,02; m_2=1,01 и m=0,6; m_1=1,01; m_2=1,02. Видно, что при большом значении m мутантная популяция со стратегией, более далёкой от симметричной миграции, вытесняет резидентную популяцию, а при малых скоростях миграции хищника — наоборот, «побеждает» популяция с более близкой к симметричной миграции стратегией.

Полученные результаты позволяют дать содержательную биологическую интерпретацию механизму группирования. Симметричная миграция жертвы, соответствующая равномерному распределению по однородному ареалу, перестаёт быть эволюционно притягивающей, когда

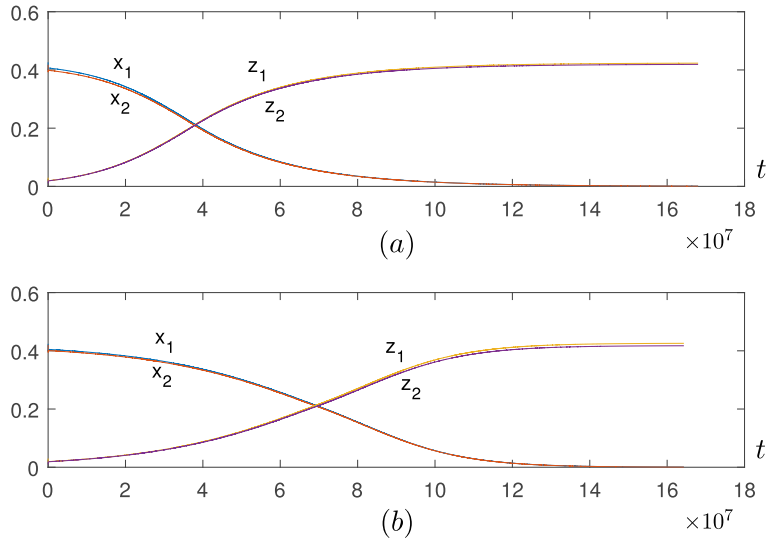


Рис. 1. График инвазии мутанта при $a = 2$, $b = 1$, $c = 0$, $d = 0,3$, $\varepsilon = 1$, $n = 1$, (a) m=0,7, $m_1 = 1,02$, m_2=1,01; (b) $m = 0,74$, $m_1 = 1,01$, $m_2 = 1,02$

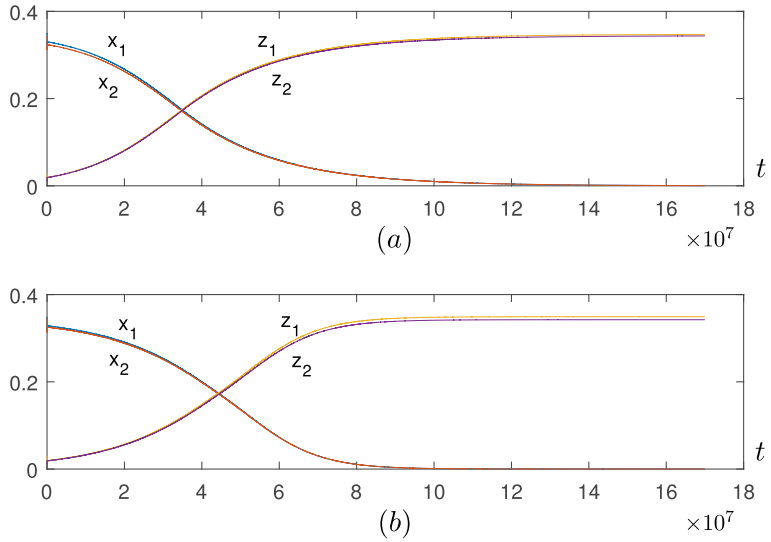


Рис. 2. График инвазии мутанта при $a = 2$, $b = 1$, $c = 0,1$, $d = 0,2$, $\varepsilon = 1$, $n = 1$, (a) $m = 0,61$, $m_1 = 1,02$, $m_2 = 1,01$; (b) $m = 0,65$, $m_1 = 1,01$, $m_2 = 1,02$

приспособленность особей возрастает с ростом локальной плотности в окрестности устойчивого равновесия. В этом случае преимущество, получаемое от нахождения в группе (защита от хищника, совместная охота), перевешивает выгоды равномерного использования ресурса, и отбор благоприятствует стратегиям, ведущим к скоплению особей. Существенно, что направление эволюции зависит не только от свойств самой жертвы, но и от подвижности хищника: при малых значениях m хищник слабо перераспределяется между местообитаниями, и давление хищничества оказывается недостаточным, чтобы преодолеть тенденцию к симметричной миграции. Лишь при $m > m^*$ пространственная динамика хищника создаёт условия, при которых группирование становится эволюционно выгодным. Таким образом, модель предсказывает нетривиальную связь между поведением жертвы и пространственной активностью её естественного врага. Следует, однако, отметить ограничения предложенного подхода: рассматривается дискретный ареал из двух местообитаний, бесполое размножение и постоянные значения параметров, а эволюция сводится к изменению единственного параметра m_1 при

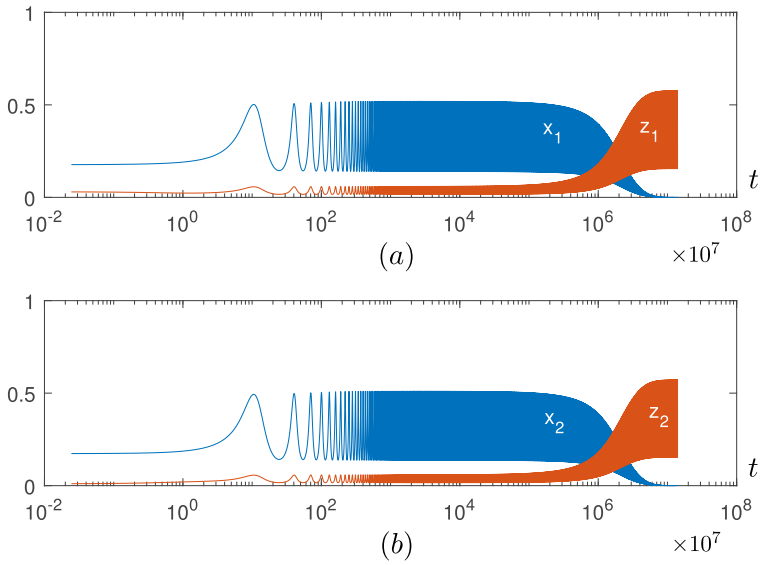


Рис. 3. График инвазии мутанта при $a = 2$, $b = 1$, $c = 0$, $d = 0,2$, $\varepsilon = 1$, $m = 0,2$, $n = 1$, $m_1 = 1,02$, $m_2 = 1,01$

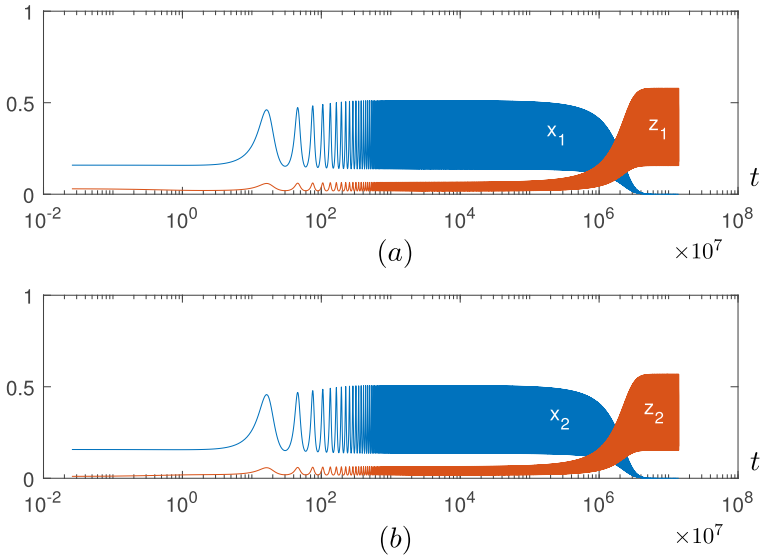


Рис. 4. График инвазии мутанта при $a = 2$, $b = 1$, $c = 0$, $d = 0,2$, $\varepsilon = 1$, $m = 0,6$, $n = 1$, $m_1 = 1,01$, $m_2 = 1,02$

фиксированном n. Распространение результатов на непрерывные ареалы, на модели с половой структурой и на случай совместной эволюции миграции жертвы и хищника представляет собой естественное направление дальнейших исследований.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Теория идеального свободного распределения утверждает [1], что при определённых условиях популяция распределяется пропорционально ресурсу. Одним из этих условий является убывание приспособленности с ростом плотности популяции. В настоящей статье предложена модель, описывающая эволюцию группирования особей популяции, обладающей эффектом Олли. Показано, что симметричная миграция может быть эволюционно отталкивающей стратегией для жертвы, если её приспособленность возрастает с ростом плотности в окрестности устойчивого равновесия. Это означает, что эволюция ведёт к группированию жертв, даже

когда изначальная миграция жертв близка к симметричной. Но для этого также скорость миграции хищника должна быть больше найденного критического значения. Также получены условия эволюционной стабильности и эволюционного притяжения стратегии $m_1 = 0$.

Автор благодарен рецензенту за полезные вопросы и замечания, способствовавшие улучшению работы.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-21-00419). Других источников финансирования проведения или руководства данным конкретным исследованием не было.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

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

ПРИЛОЖЕНИЕ: АНАЛИЗ УСТОЙЧИВОСТИ ПОЛОЖИТЕЛЬНОГО РАВНОВЕСИЯ СИСТЕМЫ (1)

$$\begin{aligned} \dot{x}_1 &= x_1[(x_1{+}c)(1-x_1) - ay_1] + \varepsilon(m_1 x_2 - n x_1), \\ \dot{x}_2 &= x_2[(x_2{+}c)(1-x_2) - ay_2] - \varepsilon(m_1 x_2 - n x_1), \\ \dot{y}_1 &= y_1(-d + bx_1 - y_1) + \varepsilon m(y_2 - y_1), \\ \dot{y}_2 &= y_2(-d + bx_2 - y_2) - \varepsilon m(y_2 - y_1). \end{aligned} \tag{A1}$$

Сначала исследуем устойчивость положительного равновесия системы без миграции. В этом случае система (A1) разделяется на две одинаковые подсистемы:

$$\begin{aligned} \dot{x} &= x[(x{+}c)(1-x) - ay], \\ \dot{y} &= y(-d + bx - y). \end{aligned} \tag{A2}$$

При $a > 0$, $c + d > 0$, $d < b$ данная система имеет положительное равновесие, которое даётся следующими формулами:

$$\begin{aligned} x^* &= \frac{1 - ab{-}c + \sqrt{(ab{+}c-1)^2 + 4(ad{+}c)}}{2}, \\ y^* &= \frac{(x^*{+}c)(1-x^*)}{a}. \end{aligned} \tag{A3}$$

Матрица Якоби системы (A2) для равновесия (x^*, y^*) имеет следующий вид:

$$\begin{pmatrix} x^*(1{-}c - 2x^*) & -ax^* \\ by^* & -y^* \end{pmatrix}.$$

Характеристическое уравнение в том же равновесии равно

$$\lambda^2 + [x^*(2x^* - 1{+}c) + y^*]\lambda + x^*y^*(2x^* - 1 + c + ab) = 0.$$

Матрица Якоби системы (A1) при $m_1 = n$ записывается следующим образом:

$$J = \begin{pmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} & 0 \\ j_{12} & j_{22} & 0 & j_{24} \\ j_{31} & 0 & j_{33} & j_{34} \\ 0 & j_{42} & j_{34} & j_{44} \end{pmatrix}, \tag{A4}$$

где

$$j_{11} = x_1(2-3x_1)+c(1-2x_1) - ay_1 - \varepsilon n, \quad j_{12} = \varepsilon n, \quad j_{13} = -ax_1,$$
$$j_{22} = x_2(2-3x_2)+c(1-2x_2) - ay_2 - \varepsilon n, \quad j_{24} = -ax_2, \quad j_{31} = by_1,$$
$$j_{33} = -d + bx_1 - 2y_1 - \varepsilon m, \quad j_{34} = \varepsilon m, \quad j_{42} = by_2, \quad j_{44} = -d + bx_2 - 2y_2 - \varepsilon m.$$

Для однородного положительного равновесия (x^*, x^*, y^*, y^*) она равна

$$J = \begin{pmatrix} x^*(1-c-2x^*) - \varepsilon n & \varepsilon n & -ax^* & 0 \\ \varepsilon n & x^*(1-c-2x^*) - \varepsilon n & 0 & -ax^* \\ by^* & 0 & -y^* - \varepsilon m & \varepsilon m \\ 0 & by^* & \varepsilon m & -y^* - \varepsilon m \end{pmatrix}$$

Собственные значения даются следующими выражениями:

$$\lambda_{1,2} = \frac{x^*(1-c-2x^*) - y^* \pm \sqrt{[x^*(2x^*-1+c) - y^*]^2 - 4abx^*y^*}}{2}, \tag{A5}$$
$$\lambda_{3,4} = \frac{1}{2}\left[x^*(1-c-2x^*) - y^* - 2\varepsilon(n+m) \pm \sqrt{[x^*(2x^*-1+c) - y^* + 2\varepsilon(n-m)]^2 - 4abx^*y^*}\right].$$

Равновесие устойчиво при

$$x^*(2x^*-1+c) + y^* > 0, \tag{A6}$$
$$2x^* - 1 + c + ab > 0, \tag{A7}$$
$$F_1 = (y^* + 2\varepsilon m)[x^*(2x^*-1+c) + 2\varepsilon n] + abx^*y^* > 0. \tag{A8}$$

Правые части системы (A1) гладкие, поэтому согласно теореме о неявной функции при $m_1 = n + \delta$, $0 < |\delta| << 1$ и выполнении условий (A6)–(A8) система (A1) имеет асимптотически устойчивое положительное равновесие (см. [26]).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Fretwell S.D., Lucas H.L. Jr.* On territorial behavior and other factors influencing habitat selection in birds. I. Theoretical development // Acta Biotheoretica. 1970. V. 19. P. 16–36.
2. *Cantrell R.S., Cosner C., Lou Y.* Evolution of dispersal and the ideal free distribution // Math. Biosci. Eng. 2010. V. 7. P. 17–36.
3. *Sirovnik J., Voelkl B., Keeling L., Wurbel H., Toscano M.* Breakdown of the ideal free distribution under conditions of severe and low competition // Behav. Ecol. Sociobiol. 2021. V. 75. Article number 31; DOI: 10.1007/s00265-020-02949-3
4. *Gejji R., Lou Y., Munther D., Peyton J.* Evolutionary Convergence to Ideal Free Dispersal Strategies and Coexistence // Bull. Math. Biol. 2012. V. 74. P. 257–299.
5. *Okubo A., Levin S.A.* Diffusion and Ecological Problems: Modern Perspectives. N. Y.: Springer-Verl., 2001.
6. *Cantrell R.S., Cosner C.* Spatial Ecology via Reaction-Diffusion Equations. John Wiley and Sons, 2003.
7. *Hastings A.* Can spatial variation alone lead to selection for dispersal? // Theor. Popul. Biol. 1983. V. 24. P. 244–251.
8. *Dockery J., Hutson V., Mischaikow K., Pernarowski M.* The evolution of slow dispersal rates: A reaction-diffusion model // J. Math. Biol. 1998. V. 37. P. 61–83.
9. *Lam K.-Y., Lou Y.* Evolutionarily Stable and Convergent Stable Strategies in Reaction-Diffusion Models for Conditional Dispersal // Bull Math Biol. 2014. V. 76. P. 261–291.

10. *Фрисман Е.Я., Кулаков М.П., Ревуцкая О.Л., Жданова О.Л., Неверова Г.П.* Основные направления и обзор современного состояния исследований динамики структурированных и взаимодействующих популяций // Компьютерные исследования и моделирование. 2019. Т. 11, № 1. С. 119–151.

11. *Shaw A.K., Kokko H.* Dispersal evolution in the presence of Allee effects can speed up or slow down invasions // Am. Nat. 2015. V. 185, N 5. P. 631–639.

12. *Weiss-Lehman C., Shaw A. K.* Understanding the drivers of dispersal evolution in range expansions and their ecological consequences // Evol. Ecol. 2022. V. 36. P. 187–197.

13. *Kanarek A.R., Webb C.T.* Allee effects, adaptive evolution, and invasion success // Evol. Appl. 2010. V. 3, N 2. P. 122–135.

14. *Tyutyunov Y.V., Sen D., Titova L.I., Banerjee M.* Predator overcomes the Allee effect due to indirect prey-taxis // Ecological Complexity. 2019. V. 39. Article number 100772; DOI: 10.1016/j.ecocom.2019.100772

15. *Епифанов А.В., Цибулин В.Г.* Моделирование колебательных сценариев сосуществования конкурирующих популяций // Биофизика. 2016. Т. 61, № 4. С. 823–832.

16. *Епифанов А.В., Цибулин В.Г.* Математическая модель идеального свободного распределения родственных популяций на неоднородном ареале // Владикавказский мат. журн. 2023. Т. 25, № 2. С. 78–88.

17. *Tsybulin V., Zelenchuk P.* Predator-prey dynamics and ideal free distribution in a heterogeneous environment // Mathematics. 2024. V. 12, N 2. P. 275.

18. *Зеленчук П.А., Цибулин В.Г.* Математическая модель идеального свободного распределения в системе хищник – жертва // Современная математика. Фундаментальные направления. 2023. Т. 69, № 2. С. 237–249.

19. *Будянский А.В., Цибулин В.Г.* Моделирование конкуренции популяций с учётом многофакторного таксиса // Сиб. журн. индустр. математики. 2023. Т. 26, № 3. С. 14–25.

20. *Базыкин А.Д.* Нелинейная динамика взаимодействующих популяций. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003.

21. *Diekmann O.A.* A beginner's guide to adaptive dynamics // Banach Center Publications. 2003. V. 63, N 1. P. 47–86.

22. *Maynard Smith J.* Evolutionary Genetics. Oxford University Press, 1998.

23. *Priklopil T., Lehmann L.* Invasion implies substitution in ecological communities with class-structured populations // Theor. Popul. Biol. 2020. V. 134. P. 36–52.

24. *Meszéna G., Gyllenberg M., Jacobs F.J.A., Metz J.A.J.* Link between Population Dynamics and Dynamics of Darwinian Evolution // Phys. Rev. Lett. 2005. V. 95, N 7. P. 078105.

25. *Cantrell R.S., Cosner C., Lam K.-Y.* Resident-invader dynamics in infinite-dimensional systems // J. Differ. Equ. 2017. V. 263, N 8. P. 4565–4616.

26. *Свирежев Ю.М., Логофет Д.О.* Устойчивость биологических сообществ. М.: Наука, 1978.

SIBERIAN JOURNAL OF INDUSTRIAL MATHEMATICS

UDC 575.827.2:575.857:51–76

MATHEMATICAL MODEL OF THE EVOLUTION OF ANIMAL GROUPING

© 2026 A. V. Epifanov

Southern Federal University,
Bolshaya Sadovaya st., 105/42, Rostov-on-Don 344006, Russia

E-mail: epifanov-av@yandex.ru

Received 17.10.2025, revised 30.08.2026, accepted 14.10.2026

Abstract. The mechanism of grouping in organisms whose population exhibit the Allee effect is investigated. To this end, a mathematical model of the evolution of dispersal in a homogeneous environment of prey individuals is considered. Conditions on the parameters under which a symmetrical dispersal strategy is convergence stable are found. When fitness increases with population density near a stable equilibrium, evolution can lead to grouping of individuals even if the initial dispersal is close to symmetrical. A critical value of predator dispersal rate is determined, beyond which the convergence stability of the prey's symmetrical dispersal strategy is replaced by evolutionary repulsion.

Keywords: adaptive dynamics, evolution of dispersal, predator – prey, collective animal behavior, Allee effect.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.303

REFERENCES

1. Fretwell S.D., Lucas H.L. Jr. On territorial behavior and other factors influencing habitat selection in birds. I. Theoretical development. *Acta Biotheoretica*, 1970, Vol. 19, pp. 16–36.
2. Cantrell R.S., Cosner C., Lou Y. Evolution of dispersal and the ideal free distribution. *Math. Biosci. Eng.*, 2010, Vol. 7, pp. 17–36.
3. Sirovnik J., Voelkl B., Keeling L., Wurbel H., Toscano M. Breakdown of the ideal free distribution under conditions of severe and low competition. *Behav. Ecol. Sociobiol.*, 2021, Vol. 75. Article number 31; DOI: 10.1007/s00265-020-02949-3
4. Gejji R., Lou Y., Munther D., Peyton J. Evolutionary Convergence to Ideal Free Dispersal Strategies and Coexistence. *Bull. Math. Biol.*, 2012, Vol. 74, pp. 257–299.
5. Okubo A., Levin S.A. Diffusion and Ecological Problems: Modern Perspectives. N. Y.: Springer-Verl., 2001.
6. Cantrell R.S., Cosner C. Spatial Ecology via Reaction-Diffusion Equations. John Wiley and Sons, 2003.
7. Hastings A. Can spatial variation alone lead to selection for dispersal? *Theor. Popul. Biol.*, 1983, Vol. 24, pp. 244–251.
8. Dockery J., Hutson V., Mischaikow K., Pernarowski M. The evolution of slow dispersal rates: A reaction-diffusion model. *J. Math. Biol.*, 1998, Vol. 37, pp. 61–83.
9. Lam K.-Y., Lou Y. Evolutionarily Stable and Convergent Stable Strategies in Reaction-Diffusion Models for Conditional Dispersal. *Bull Math Biol.*, 2014, Vol. 76, pp. 261–291.
10. Frisman E.Ya., Kulakov M.P., Revuczkaya O.L., Zhdanova O.L., Neverova G.P. Osnovny'e napravleniya i obzor sovremennogo sostoyaniya issledovanij dinamiki strukturirovanny'x i vzaimodejstvuyushhix

English translation is published in Journal of Applied and Industrial Mathematics, 2026, Vol. 20, No. 3.

populyacij [The main directions and an overview of the current state of research on the dynamics of structured and interacting populations]. *Comput. Research and Modeling*, 2019, Vol. 11, No. 1, pp. 119–151 (in Russian).

11. Shaw A.K., Kokko H. Dispersal evolution in the presence of Allee effects can speed up or slow down invasions. *Am. Nat.*, 2015, Vol. 185, No. 5, pp. 631–639.
12. Weiss-Lehman C., Shaw A. K. Understanding the drivers of dispersal evolution in range expansions and their ecological consequences. *Evol. Ecol.*, 2022, Vol. 36, pp. 187–197.
13. Kanarek A.R., Webb C.T. Allee effects, adaptive evolution, and invasion success. *Evol. Appl.*, 2010, Vol. 3, No. 2, pp. 122–135.
14. Tyutyunov Y.V., Sen D., Titova L.I., Banerjee M. Predator overcomes the Allee effect due to indirect prey-taxis. *Ecological Complexity*, 2019, Vol. 39. Article number 100772; DOI: 10.1016/j.ecocom.2019.100772
15. Epifanov A.V., Cibulin V.G. Modelirovanie kolebatel'ny'x scenariev sosushhestvovaniya konkuriruyushhix populyacij [Modeling of oscillatory scenarios of coexistence of competing populations]. *Biophysics*, 2016, Vol. 61, No. 4, pp. 823–832.
16. Epifanov A.V., Cibulin V.G. Matematicheskaya model' ideal'nogo svobodnogo raspredeleniya rodstvennykh populyacij na neodnorodnom areale [A mathematical model of the ideal free distribution of related populations in a heterogeneous habitat]. *Vladikavkaz Math. J.*, 2023, Vol. 25, No. 2, pp. 78–88 (in Russian).
17. Tsybulin V., Zelenchuk P. Predator-prey dynamics and ideal free distribution in a heterogeneous environment. *Mathematics*, 2024, Vol. 12, No. 2, pp. 275.
18. Zelenchuk P.A., Cibulin V.G. Matematicheskaya model' ideal'nogo svobodnogo raspredeleniya v sisteme xishhnik – zhertva [The mathematical model of the ideal free distribution in the predator–prey system]. *Modern Math.. Fundamental Directions*, 2023, Vol. 69, No. 2, pp. 237–249 (in Russian).
19. Budyanskij A.V., Cibulin V.G. Modelirovanie konkurencii populyacij s uchyotom mnogofaktornogo taksisa [Modeling population competition taking into account multifactorial taxis]. *Sib. Zhurn. Indust. Mat.*, 2023, Vol. 26, No. 3, pp. 14–25 (in Russian).
20. Bazykin A.D. Nelinejnaya dinamika vzaimodejstvuyushhix populyacij [Nonlinear dynamics of interacting populations]. Moscow–Izhevsk: Institute of Computer Research, 2003 (in Russian).
21. Diekmann O.A. A beginner's guide to adaptive dynamics. *Banach Center Publications*, 2003, Vol. 63, No. 1, pp. 47–86.
22. Maynard Smith J. Evolutionary Genetics. Oxford University Press, 1998.
23. Priklopil T., Lehmann L. Invasion implies substitution in ecological communities with class-structured populations. *Theor. Popul. Biol.*, 2020, Vol. 134, pp. 36–52.
24. Meszéna G., Gyllenberg M., Jacobs F.J.A., Metz J.A.J. Link between Population Dynamics and Dynamics of Darwinian Evolution. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, Vol. 95, No. 7, pp. 078105.
25. Cantrell R.S., Cosner C., Lam K.-Y. Resident-invader dynamics in infinite-dimensional systems. *J. Differ. Equ.*, 2017, Vol. 263, No. 8, pp. 4565–4616.
26. Svirezhev Yu.M., Logofet D.O. Ustojchivost' biologicheskix soobshhestv [Stability of Biological Communities]. Moscow: Nauka, 1978 (in Russian).

УДК 517.957:532.529

ЗАДАЧА ОБ ИНИЦИИРОВАНИИ ДИФФУЗИОННОЙ ВОЛНЫ ДЛЯ СИСТЕМЫ РЕАКЦИИ-ДИФФУЗИИ ПРИ СМЕШАННЫХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЯХ

© 2026 А. Л. Казаков[1a], Л. Ф. Спевак[2b]

[1] *Институт динамики систем и теории управления им. В. М. Матросова СО РАН, ул. Лермонтова, 134, г. Иркутск 664033, Россия,*
[2] *Институт машиноведения им. Э. С. Горкунова УрО РАН, ул. Комсомольская, 34, г. Екатеринбург 620049, Россия*

E-mails: [a]kazakov@icc.ru, [b]lfs@imach.uran.ru

Поступила в редакцию 29.12.2025 г.; после доработки 21.09.2026 г.;
принята к публикации 03.10.2026 г.

Для системы двух вырождающихся нелинейных параболических уравнений типа реакция-диффузия исследуется новая граничная задача, отличительной особенностью которой является наличие граничных условий разных типов для двух искомых функций: для одной из них задаётся уравнение движущегося нулевого фронта, а для другой — краевой режим в неподвижной точке. Целью работы является построение решений поставленной задачи в виде диффузионной волны с нулевым фронтом. Сформулирована и конструктивно доказана новая теорема существования решения рассмотренной задачи, показано, что оно имеет искомый тип. Предложен новый численный алгоритм, основанный на методе коллокаций и разностной аппроксимации по времени. Для его верификации проведён вычислительный эксперимент, численные решения тестировались сравнением с известными точными решениями. Результаты расчётов показали хорошую точность при различных параметрах задачи, а также численную сходимость предложенного алгоритма.

Ключевые слова: нелинейная параболическая система, граничные условия, вырождение, теорема существования, точное решение, численное решение.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.304

ВВЕДЕНИЕ

В настоящей статье авторы продолжают изучение вырождающихся нелинейных параболических [1] уравнений и систем, которые, как известно, имеют широкий спектр приложений. Они используются при моделировании процессов различной природы, происходящих в сплошных средах — теплопроводности [2], диффузии, фильтрации жидкостей и газов в пористой среде [3, 4], конвекции [5, 6]. Базовые сведения об этих математических объектах можно найти в монографии [7].

Для современного математического моделирования представляют особый интерес нелинейные параболические уравнения и системы с вырождением [8], поскольку в этом случае у них появляются решения, которые способны описать возмущения, распространяющиеся по покоящемуся фону с конечной скоростью [2, 9]. Подобные математические объекты представляют собой составные кусочно-гладкие решения из двух частей: неотрицательной и нулевой, непрерывно состыкованных между собой на некоторой линии (поверхности) — нулевом фронте. Отметим, что нетривиальное решение меняет знак при переходе через нулевой фронт, однако при этом нарушается единственность, что позволяет заменить отрицательную (нефизичную) часть нетривиального решения тождественным нулём.

Впервые такие решения, которые в литературе именуются тепловыми, фильтрационными, диффузионными волнами (в зависимости от их физической интерпретации) [10, 11], были использованы для описания высокотемпературных процессов в физике плазмы в работе [12] и фильтрации жидкостей и газов в пористых пластах грунта (см., например, [13]). Квазилинейные параболические уравнения и их решения типа фильтрационной (тепловой, диффузионной) волны изучаются в научной школе академика А. Ф Сидорова (см. [10, 14]), к которой принадлежат авторы, уже около 40 лет. До недавнего времени в исследованиях рассматривались только отдельные уравнения, однако в последние годы предпринимаются усилия по распространению полученных результатов на случай систем [15]. В ходе проведённых исследований понятие диффузионной волны было существенно обобщено: так, была исследована диффузионная волна с двумя различными нулевыми фронтами [16]. Для случая двух различных нулевых фронтов диффузионная волна состоит уже из трёх частей: 1) обе функции положительны; 2) одна из функций положительна, другая равна нулю; 3) обе функции равны нулю (трёхчастная структура).

Подробно о современном состоянии исследований в этой области можно прочитать в наших недавних публикациях [17, 18], а здесь мы сделаем акцент на новых аспектах в постановках, основное внимание уделив граничным условиям, при которых изучается система. Ранее нами рассмотрены два вида граничных задач для системы реакции-диффузии. В первом случае граничными условиями задаются уравнения движения нулевых фронтов (подвижных многообразий), совпадающих [15] или различных [16], для двух искомых функций. Второй тип — это задачи об инициировании диффузионной волны, в которых для искомых функций на неподвижном многообразии задают краевые условия [17, 18]. Аналогичные постановки были ранее сформулированы для одного уравнения [10] и были исследованы нами в большом количестве работ (см., например [19]). Таким образом, во всех исследованных нами ранее задачах краевые условия для двух искомых функций были одного типа. Следует отметить, что подобных задач для систем у других авторов нами не найдено. Наиболее близкие граничные условия рассмотрены в работе [20] для нелокальной параболической системы в следующем виде:

$$u_i|_{x=\alpha(t)} = u_i|_{x=\beta(t)} = 0, \tag{1}$$

где $u_i(t,x)$ — искомые функции, $x \in [\alpha(t), \beta(t)]$, $t \in [0,T]$. Функции $x = \alpha(t)$, $x = \beta(t)$ задают, таким образом, два подвижных нулевых фронта, совпадающих для всех искомых функций. В большинстве же работ задаются краевые условия на неподвижных границах. Например, в работе [21] для сингулярно возмущённой системы реакция-диффузия рассмотрены условия вида (1) при $\alpha(t) \equiv 0$, $\beta(t) \equiv 1$. Также в научной литературе рассматриваются решения квазилинейных параболических систем типа бегущих волн [22, 23], которые тоже отличаются от того, что исследуется в наших работах.

В данной статье исследуется задача для вырождающейся системы реакции-диффузии, когда для двух искомых функций заданы граничные условия разных типов (смешанные). Именно, для одной из них задаётся уравнение подвижного нулевого фронта, а для второй — краевой режим в неподвижной точке. При этом предполагается наличие нулевого фронта и для второй функции. Насколько нам известно, подобная постановка задачи рассматривается впервые. Во всяком случае, соответствующих публикаций нам найти не удалось. Разный вид двух граничных условий приводит к тому, что пошаговые алгоритмы построения искомых функций, по сравнению с известными работами, существенно усложняются. Как и в предыдущих наших статьях, проведено комплексное численно-аналитическое исследование новой задачи: сформулирована и доказана теорема существования и единственности решения в классе аналитических функций; предложен алгоритм численного решения по шагам по времени; проведён вычислительный эксперимент для верификации численных решений, при этом были использованы точные решения системы, найденные нами ранее.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим систему параболических уравнений типа «реакция-диффузия»

$$u_t = uu_{xx} + u_x^2/\sigma + F(u,v), \qquad v_t = vv_{xx} + v_x^2/\delta + G(u,v), \tag{2}$$

где t, x — скалярные независимые переменные, $u(t,x)$, $v(t,x)$ — неизвестные функции, σ, δ — положительные константы, F, G — известные достаточно гладкие функции своих аргументов такие, что $F(0,0) = G(0,0) = 0$. Легко убедиться, что при сделанных предположениях система (2) имеет тривиальное решение $u \equiv 0$, $v \equiv 0$.

Для системы (2) рассмотрим смешанные краевые условия

$$u|_{x=a(t)} = 0, \tag{3}$$

$$v|_{x=0} = g(t). \tag{4}$$

Здесь $a(t)$, $g(t)$ — достаточно гладкие функции, удовлетворяющие условиям $a(0) = g(0) = 0$, $a'(0) > 0$, $g'(0) > 0$. Таким образом, для функции u задан нулевой фронт, а для v – краевой режим в точке $x = 0$.

Будем искать решение задачи (2)—(4) в классе аналитических функций в окрестности точки $t = 0, x = 0$ и покажем, что при выполнении некоторых дополнительных предположений оно существует и обладает следующими свойствами:

1) функция $v(t,x)$ удовлетворяет условию

$$v|_{x=b(t)} = 0 \tag{5}$$

для некоторой, априори неизвестной, функции $b(t)$, $b(0) = 0$, $b'(0) > 0$;

2) $u > 0$, $v > 0$ при $0 < x < a(t)$ для малых t. Иначе говоря, это решение можно рассматривать как первую часть (см. выше) диффузионной волны.

2. ТЕОРЕМА СУЩЕСТВОВАНИЯ И ЕДИНСТВЕННОСТИ

В данном разделе будет доказана основная теорема данного исследования. Под аналитической на некотором множестве далее понимается функция, совпадающая на этом множестве со своим тейлоровским разложением.

Теорема. *Пусть выполнены следующие условия:*

1) *функции $a(t)$, $g(t)$ являются аналитическими в некоторой окрестности точки $t = 0$;*
2) *функции $F(u,v)$, $G(u,v)$ являются аналитическими в некоторой окрестности точки $u = 0,\ v = 0$;*
3) *$a(0) = 0$, $a'(0) > 0$, $g(0) = 0$, $F(0,0) = 0$, $G(0,0) = 0$;*
4) *$g'(0) > \delta[a'(0)]^2$.*

Тогда задача (2)–(4) имеет в некоторой окрестности точки $(t = 0, x = 0)$ аналитическое решение, для которого $v|_{x=a(t)} > 0$ при $t > 0$; $u > 0$, $v > 0$ при $0 < x < a(t)$. Иных аналитических решений с такими свойствами не существует.

Доказательство. Предваряя рассуждения, обосновывающие данную теорему, отметим, что решение задачи (2)–(4) далее строится в виде кратного ряда по степеням переменных t и $z = x - a(t)$, который рассматривается в полной окрестности точки $t = 0, x = 0$ или, что равносильно, $t = 0, z = 0$.

Для удобства дальнейших выкладок сделаем в задаче (2)–(4) замену независимых переменных

$$\tau = t, \quad z = x - a(t). \tag{6}$$

Якобиан замены (6) $J = 1$, т. е. она невырожденная. При такой замене задача (2)–(4) примет вид

$$u_\tau = a'(\tau)u_z + uu_{zz} + u_z^2/\sigma + F(u,v), \quad v_\tau = a'(\tau)v_z + vv_{zz} + v_z^2/\delta + G(v,u), \tag{7}$$

$$u|_{z=0} = 0, \quad v|_{z=-a(\tau)} = g(\tau). \tag{8}$$

Задача (7), (8) близка к обобщённой задаче Коши [24], которая рассматривалась нами ранее, однако не подпадает под действие доказанных теорем.

Из условия 1) теоремы вытекает, что функции $a(\tau)$ и $g(\tau)$ могут быть разложены в сходящиеся ряды

$$g(\tau) = \sum_{k=0}^{\infty} g_k \frac{\tau^k}{k!}, \quad g_k = \left.\frac{d^k g}{d\tau^k}\right|_{\tau=0}, \quad a(\tau) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \frac{\tau^k}{k!}, \quad a_k = \left.\frac{d^k a}{d\tau^k}\right|_{\tau=0}.$$

Решение задачи (7), (8) будем искать в виде

$$u = \sum_{k,l=0}^{\infty} u_{k,l} \frac{\tau^k}{k!}\frac{z^l}{l!}, \quad u_{k,l} = \left.\frac{\partial^{k+l} u}{\partial\tau^k \partial z^l}\right|_{\substack{\tau=0,\\ z=0}}; \quad v = \sum_{k,l=0}^{\infty} v_{k,l} \frac{\tau^k}{k!}\frac{z^l}{l!}, \quad v_{k,l} = \left.\frac{\partial^{k+l} v}{\partial\tau^k \partial z^l}\right|_{\substack{\tau=0,\\ z=0}}, \tag{9}$$

коэффициенты ряда (9) определяются индукцией по суммарному номеру коэффициентов $n = k + l$.

Установим базу индукции. Из условия 3) имеем, что $u_{0,0} = 0,\ v_{0,0} = 0$.

Из первого условия (8) следует, что $u_{n,0} = 0$ при всех $n \in \mathbb{N}$, включая $u_{1,0} = 0$. Для определения $u_{0,1}$, положив в первом уравнении (7) $\tau = z = 0$, получим квадратное уравнение

$$u_{0,1}^2/\sigma + a_1 u_{0,1} = 0, \tag{10}$$

имеющее корни $u_{0,1} = 0,\ u_{0,1} = -\sigma a_1$. Можно убедиться, что нулевой корень приводит к тому, что функция $u \equiv 0$, поэтому примем далее, что $u_{0,1} = -\sigma a_1$.

Найдём теперь $v_{0,1},\ v_{1,0}$. Для этого положим во втором уравнении (7) $\tau = z = 0$. Получим квадратное уравнение

$$v_{1,0} = a_1 v_{0,1} + v_{0,1}^2/\delta. \tag{11}$$

Также продифференцируем второе условие (8) и положим $\tau = 0$. Имеем

$$v_{1,0} - a_1 v_{0,1} = g_1. \tag{12}$$

Можно видеть, что в (11), (12) нет вторых производных. Это достигается за счёт того, что множители перед u_{zz} и v_{zz} одновременно зануляются. Система (11), (12) имеет корни $v_{0,1} = \pm\sqrt{\delta g_1}$, $v_{1,0} = g_1 \pm a_1\sqrt{\delta g_1}$. Положительное значение $v_{0,1}$ порождает решение задачи (7), (8), в котором функции u, v при $\tau > 0, z > 0$ будут иметь разные знаки, что противоречит требованиям теоремы. Поэтому положим $v_{0,1} = -\sqrt{\delta g_1}$. Отсюда $v_{1,0} = g_1 - a_1\sqrt{\delta g_1}$. Из условия 4) следует, что $v_{1,0} > 0$, что обеспечит выполнение искомых свойств $v|_{z=0} > 0$; $u > 0,\ v > 0$ при $z < 0$.

Таким образом, база индукции установлена.

Пусть известны $u_{k,l},\ v_{k,l}$ при $k + l = 2, \ldots, n$, найдём $u_{k,n+1-k},\ v_{k,n+1-k}$. Для этого будем дифференцировать уравнения системы (7) k раз по τ и $n - k$ раз по z, полагая при этом $\tau = 0,\ z = 0$. После приведения подобных слагаемых получим, что

$$\begin{gathered}
u_{n+1,0} - nu_{1,0}u_{n-1,2} - \left(\frac{2}{\sigma}u_{0,1} + a_1\right) u_{n,1} = p_{n,0};\\
u_{k+1,n-k} - ku_{1,0}u_{k-1,n-k+2} - \left[u_{0,1}\left(n - k + \frac{2}{\sigma}\right) + a_1\right] u_{k,n+1-k} = p_{k,n-k},\\
k = n-1, \ldots, 1;\\
-\left[u_{0,1}\left(n + \frac{2}{\sigma}\right) + a_1\right] u_{0,n+1} + u_{1,n} = p_{0,n}.
\end{gathered} \tag{13}$$

$$
\begin{gathered}
v_{n+1,0} - nv_{1,0}v_{n-1,2} - \left(\frac{2}{\delta}v_{0,1} + a_1\right) v_{n,1} = q_{n,0};\\
v_{k+1,n-k} - kv_{1,0}v_{k-1,n-k+2} - \left[v_{0,1}\left(n-k+\frac{2}{\delta}\right) + a_1\right] v_{k,n+1-k} = q_{k,n-k},\\
k = n-1,\ldots,1;\\
-\left[v_{0,1}\left(n+\frac{2}{\delta}\right) + a_1\right] v_{0,n+1} + v_{1,n} = q_{0,n}.
\end{gathered}
\tag{14}
$$

Иными словами, имеем две системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). Формулы для $p_{k,n-k},\ q_{k,n-k}$ здесь не приводятся ввиду громоздкости. Отметим лишь, что они зависят от величин, которые известны в силу предположения индукции. Представление о том, как выглядят соответствующие выражения, можно составить по статье [19]. Отметим, что системы (13) и (14) незамкнутые, в них уравнений на 1 меньше, чем искомых величин. Для замыкания необходимо рассмотреть условия (8).

Напомним, что из первого условия (8) имеем $u_{n+1,0} = 0$. Учитывая это и ранее найденные значения $u_{0,1},\ u_{1,0}$, СЛАУ (13) можно существенно упростить

$$
\begin{gathered}
a_1 u_{n,1} = p_{n,0};\\
u_{k+1,n-k} + a_1\left[(n-k)\sigma + 1\right] u_{k,n+1-k} = p_{k,n-k}, \quad k = n-1,\ldots,1;\\
a_1(n\sigma+1)u_{0,n+1} + u_{1,n} = p_{0,n}.
\end{gathered}
\tag{15}
$$

СЛАУ (15) является двухдиагональной, причём на главной диагонали матрицы системы находятся величины $a_1[\sigma(n-k)+1]$, $k = n,\ldots,0$, которые являются положительными по условию теоремы, т.е. (15) однозначно разрешима, причём, фактически, прямой ход метода Гаусса уже выполнен.

Для замыкания СЛАУ (14) продифференцируем второе условие (8) $n+1$ раз по τ, используя двумерный аналог формулы Фаа-Ди-Бруно [25]

$$
\left(\sum_{k_1+2k_2+\cdots+(n+1)k_{n+1}=n+1} \frac{(n+1)!\Xi_1^{k_1}\Xi_2^{k_2}\ldots\Xi_{n+1}^{k_{n+1}}}{k_1!k_1!\ldots k_{n+1}!}\right) v(\tau,z) = g_{n+1},
\tag{16}
$$

где

$$
\Xi_1 = \frac{\partial}{\partial\tau} - a'(\tau)\frac{\partial}{\partial z}, \quad \Xi_i = -\frac{a^{(i)}(\tau)}{i!}\frac{\partial}{\partial z}, \quad i \geqslant 2; \quad k_j \geqslant 0.
$$

Положив в (16) $\tau = z = 0$, получим равенство, содержащее коэффициенты $v_{k,l}$, $k+l = 1,2,\ldots,n+1$:

$$
\sum_{k=0}^{n+1} C_{n+1}^k (-a_1)^k v_{n+1-k,k} = g_{n+1} - \Upsilon_n,
\tag{17}
$$

где

$$
\Upsilon_n = \left(\sum_{k_1+2k_2+\cdots+(n+1)k_{n+1}=n+1,\ k_1<n} \frac{(n+1)!\Xi_1^{k_1}\Xi_2^{k_2}\ldots\Xi_{n+1}^{k_{n+1}}}{k_1!k_1!\ldots k_{n+1}!}\right) v(\tau,z)\Bigg|_{\tau=0,z=0}
$$

и зависит от величин, известных в силу предположения индукции.

Таким образом, получена СЛАУ

$$
A_{n+1}\mathbf{v}_{n+1} = \mathbf{q}_n,
\tag{18}
$$

где $\mathbf{v}_{n+1} = (v_{0,n+1}, v_{1,n}, \ldots, v_{n,1})^T$ — вектор искомых величин; квадратная матрица A_{n+1} и вектор $\mathbf{q}_n = (q_{0,n}, q_{1,n-1}, \ldots, q_{n,0})^T$ известны.

Пусть $\gamma = -2v_{0,1}/\delta - a_1 = 2\sqrt{g_1/\delta} - a_1$, по условию 4) $\gamma > 0$; $\beta = -v_{0,1} = \sqrt{\delta g_1} > 0$, $\alpha = v_{1,0} = g_1 - a_1\sqrt{\delta g_1} > 0$, тогда матрица СЛАУ (18) перепишется в виде

$$A_{n+1} = \begin{pmatrix} \gamma + n\beta & 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ -\alpha & \gamma + (n-1)\beta & 1 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & -2\alpha & \gamma + 2\beta & 1 & \ldots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \ldots & 0 & -(n-1)\alpha & \gamma + \beta & 1 & 0 \\ 0 & \ldots & \ldots & 0 & -n\alpha & \gamma & 1 \\ 1 & -na_1 & \ldots & C_{n+1}^k(-a_1)^k & \ldots & n(-a_1)^n & (-a_1)^{n+1} \end{pmatrix}$$

или

$$A_{n+1} = \begin{pmatrix} \gamma_n & 1 & 0 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ -\alpha_1 & \gamma_{n-1} & 1 & 0 & \ldots & 0 & 0 \\ 0 & -\alpha_2 & \gamma_{n-2} & 1 & \ldots & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & \ldots & 0 & -\alpha_{n-1} & \gamma_1 & 1 & 0 \\ 0 & \ldots & \ldots & 0 & -\alpha_n & \gamma_0 & 1 \\ \theta_0^{(n+1)} & \theta_1^{(n+1)} & \ldots & \theta_k^{(n+1)} & \ldots & \theta_n^{(n+1)} & \theta_{n+1}^{(n+1)} \end{pmatrix}$$

где

$$\theta_k^{(n+1)} = (-a_1)^k C_{n+1}^k = \frac{(-a_1)^k (n+1)!}{k!(n+1-k!)}, \quad \gamma_k = \gamma + k\beta, \quad \alpha_k = k\alpha.$$

Отметим, что система (18) существенно отличается от трехдиагональных СЛАУ, которые ранее неоднократно возникали при построении аналитических решений вырождающихся параболических уравнений [19] и систем [18] в работах авторов.

Решение (18) будем строить, используя метод прогонки. Из первого уравнений выразим $v_{1,n}$ через $v_{0,n+1}$

$$v_{1,n} = -\gamma_n v_{0,n+1} + q_{0,n} = -\eta_1^{(n+1)} v_{0,n+1} + q_{0,n}^*,$$

где $\eta_1^{(n+1)} = \gamma_n$, $q_{0,n}^* = q_{0,n}$. Подставим это выражение во второе уравнение и получим, что

$$-\alpha_1 v_{0,n+1} + \gamma_{n-1}(-\gamma_n v_{0,n+1} + q_{0,n}^*) + v_{2,n} = q_{1,n-1},$$

откуда $v_{2,n} = \eta_2^{(n+1)} v_{0,n+1} + q_{1,n-1}^*$, где $\eta_2^{(n+1)} = \alpha_1 + \gamma_{n-1}\gamma_n$, $\quad q_{1,n-1}^* = q_{1,n-1} - \gamma_{n-1} q_{0,n}^*$.

И так далее, индукцией по k можно убедиться, что справедливы равенства

$$v_{k,n+1-k} = (-1)^k \eta_k^{(n+1)} v_{0,n+1} + q_{k,n-k}^*, \quad k = 1, \ldots, n+1, \tag{19}$$

где

$$\eta_0^{(n+1)} = 1, \quad \eta_1^{(n+1)} = \gamma_n, \quad \eta_{k+1}^{(n+1)} = \gamma_{n+1-k}\eta_k^{(n+1)} + \alpha_k \eta_{k-1}^{(n+1)}, \quad k = 1, \ldots, n+1,$$

известны, причём без труда можно убедиться, что $\eta_k^{(n+1)} > 0$, а $q_{k,n-k}^*$ представляют собой линейные комбинации $q_{k+i,n-k-i}$, $i = 1, \ldots, n-k$, т. е. также известны в силу предположения индукции.

Подставим выражения (19) в формулу (17). Получим равенство

$$(-1)^{n+1} \left[\sum_{k=0}^{n+1} C_{n+1}^k a_1^k \eta_{n+1-k}^{(n+1)} \right] v_{0,n+1} = g_{n+1} - \Upsilon_n^*, \tag{20}$$

где $\Upsilon_n^* = \Upsilon_n + \sum\limits_{k=0}^{n} C_{n+1}^k (-a_1)^k q_{n-k,k}^*$ — зависит от величин, известных в силу предположения индукции. Легко убедиться, что выражение в квадратных скобках в (20) строго положительно и, следовательно, $v_{0,n+1}$ определяется однозначно. Далее, пользуясь соотношениями (17), также однозначно определяем $v_{k,n+1-k}$, $k = 1, \ldots, n+1$.

Формальное решение задачи (7), (8), а, значит, и (2)–(4), в виде рядов (9) построено. Из процедуры построения коэффициентов рядов следует, что решение с искомыми свойствами является единственным.

Сходимость построенных рядов доказывается классическим методом мажорант с использованием теоремы Коши — Ковалевской [26]. Процедура является стандартной (см. [19]) и здесь, ввиду ограниченности объёма статьи, не приводится. При этом по построению имеем, что особенностей в решении не возникает, по крайней мере, в малой окрестности начала координат, где ряды сходятся. Этим завершается доказательство теоремы. □

Следствие. *В условиях теоремы искомые функции u, v положительны при $0 < x < a(t)$ и малых $t > 0$, и найдётся такая линия $x = b(t)$, что $v|_{x=b(t)} = 0$, $b(0) = 0$, $b(t) > a(t) > 0$ при $t > 0$, т. е. выполнено условие* (5).

Доказательство. Будем рассматривать решение в проколотой окрестности $\tau = 0,\ z = 0$. Воспользуемся значениями первых производных искомых функций по переменным $\tau,\ z$, полученными в ходе доказательства теоремы.

1. Поскольку $u|_{z=0} = 0$, $u_z(0,0) < 0$, имеем, что $u(\tau, z) > 0$ при $z < 0,\ \tau > 0$.

2. Из того, что $v|_{z=0} > 0$, $v_z(0,0) < 0$ следует, что $v(\tau, z) > 0$ при $z < 0$ и $\tau > 0$. Более того, поскольку $v_z(0,0) \cdot v_\tau(0,0) < 0$, найдётся такая линия $z = a^*(\tau) > 0$ при $\tau > 0$, $a^*(0) = 0$, что $v|_{z=a^*(\tau)} = 0$.

Из 1 и 2 следует справедливость доказываемого утверждения, достаточно лишь вернуться в плоскость переменных (t, x) и принять $b(t) = a^*(t) + a(t)$. □

Замечание 1. Если $g'(0) = \delta[a'(0)]^2$, то можно показать, что решение задачи (7), (8) существует и, при задании дополнительных условий на первые производные, единственно, в том числе возможно совпадение нулевых фронтов $x = a(t)$ и $x = b(t)$ (см. примеры 1, 2). Выполнение (или невыполнение) условия $v|_{x=a(t)} \geqslant 0$ здесь зависит от значений вторых производных.

Замечание 2. Случай $g'(0) < \delta[a'(0)]^2$ также представляет определённый интерес, однако он не допускает очевидной физической интерпретации и здесь не рассматривается.

3. ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ

Приближенное решение задачи (2)—(4) будем строить по шагам по времени. На каждом шаге $t_k = kh$, где h — размер шага, сформулируем изохронную краевую задачу, решением которой будут искомые функции в своих областях положительных значений:

$$u(t_k, x), \quad x \in [0, a(t_k)]; \quad v(t_k, x), \quad x \in [0, b(t_k)].$$

Будем предполагать, что выполнены условия теоремы, доказанной выше. Также, опираясь на следствие из неё, будем считать, что на рассматриваемом интервале времени для неизвестного априори значения $b(t_k)$ справедливо неравенство $b(t_k) > a(t_k)$.

Можно показать, что в сделанных предположениях из условий (3), (5) и уравнений системы (2) следуют соотношения для производных искомых функций по пространственной переменной:

$$[u_x^2/\sigma + a'(t)u_x + F(u,v)]|_{x=a(t)} = 0. \tag{21}$$

$$(v_x^2/\delta + b'(t)v_x)|_{x=b(t)} = 0. \tag{22}$$

Используя (21), сформулируем следующую краевую задачу для функции $u(t_k, x)$ на отрезке $x \in [0, L_k]$, где $L_k = a(t_k)$:

$$u_{xx}(t_k, x) = \frac{1}{u(t_k, x)} \left(u_t(t_k, x) - \frac{[u_x(t_k, x)]^2}{\sigma} - F(u(t_k, x), v(t_k, x)) \right), \tag{23}$$

$$u(t_k, L_k) = 0, \tag{24}$$

$$[u_x(t_k, L_k)]^2/\sigma + a'(t_k) u_x(t_k, L_k) + F(0, v(t_k, L_k)) = 0. \tag{25}$$

Поскольку функция $b(t)$ в задаче (2)–(4) неизвестна, для использования условия (22) аппроксимируем её. Из (22) в момент t_k имеем:

$$b'(t_k) = -\frac{v_x(t_k, l_k)}{\delta}, \tag{26}$$

где $l_k = b(t_k)$ — априори неизвестная величина. Примем на отрезке $t \in [t_{k-1}, t_k]$ квадратичную аппроксимацию функции $b(t)$ в виде:

$$b(t) = B(t^2 - t_{k-1}^2) - B(t_k + t_{k-1})(t - t_{k-1}) + \frac{l_k - l_{k-1}}{h}(t - t_{k-1}) + l_{k-1}, \tag{27}$$

где B — константа. Подставив функцию (27) в равенство (26) для моментов t_{k-1} и t_k, можно получить следующее соотношение, которые примем в качестве дополнительного граничного условия для функции $v(t_k, x)$:

$$\frac{2l_k}{h} + \frac{v_x(t_k, l_k)}{\delta} = S_{k-1}. \tag{28}$$

Здесь значение

$$S_{k-1} = \frac{2l_{k-1}}{h} - \frac{v_x(t_{k-1}, l_{k-1})}{\delta}$$

найдено на предыдущем шаге по времени t_{k-1}, если $k > 1$. Для решения на первом шаге найдём соответствующее начальному моменту времени значение S_0. Из условия (4) следует, что $v_t|_{x=0} = g'(t)$. С учётом системы (2) в момент $t = 0$ будем иметь равенство $[v_x(0, 0)]^2/\delta = g'(0)$. Тогда, согласно сделанным предположениям о направлении движения нулевых фронтов $v_x(0, 0) = -\sqrt{\delta g'(0)}$ и

$$S_0 = \sqrt{g'(0)/\delta}.$$

Таким образом, мы можем сформулировать для функции $v(t_k, x)$ краевую задачу задачу на отрезке $x \in [0, l_k]$:

$$v_{xx}(t_k, x) = \frac{1}{v(t_k, x)} \left(v_t(t_k, x) - \frac{[v_x(t_k, x)]^2}{\delta} - G(u(t_k, x), v(t_k, x)) \right), \tag{29}$$

$$v(t_k, 0) = V_k, \quad v(t_k, l_k) = 0, \tag{30}$$

$$\frac{2l_k}{h} + \frac{v_x(t_k, l_k)}{\delta} = S_{k-1}. \tag{31}$$

Здесь $V_k = g(t_k)$.

Замечание 3. Задача (29)—(31) не является переопределённой, поскольку значение l_k неизвестно.

Итак, в момент $t = t_k$ мы имеем две связанные задачи (23)—(25) и (29)—(31), для совместного решения которых построим итерационный алгоритм.

Замечание 4. При решении следует учитывать, что $L_k < l_k$, следовательно, $u(t_k, x) = 0$ при $x \in [L_k, l_k]$.

Решение будем искать в виде $u(t_k, x) = p(x)+q(x)$, $v(t_k, x) = r(x)+s(x)$, где $p(x)$ — частное решение уравнения (23); $r(x)$ — частное решение уравнения (29); $q(x)$ — решение подходящей задачи для однородного уравнения,

$$q''(x) = 0, \tag{32}$$

$$q(L_k) = -p(L_k), \tag{33}$$

$$[p'(L_k) + q'(L_k)]^2/\sigma + a'(t_k)[p'(L_k) + q'(L_k)] + F(0, r(L_k) + s(L_k)) = 0; \tag{34}$$

$s(x)$ — решение подходящей задачи для однородного уравнения,

$$s''(x) = 0, \tag{35}$$

$$s(0) = V_k - r(0), \quad s(l_k) = -r(l_k), \tag{36}$$

$$\frac{2l_k}{h} + \frac{r'(l_k) + s'(l_k)}{\delta} = S_{k-1}. \tag{37}$$

Опишем теперь этапы итерационного процесса. Далее $u^{(n)}$, $p_{(n)}$, $q_{(n)}$, $v^{(n)}$, $r_{(n)}$, $s_{(n)}$, $l_k^{(n)}$ — n-е итерации соответствующих решений и параметра.

I. Задаём начальные итерации частных решений:

$$p_{(0)} \equiv 0, \quad r_{(0)} \equiv 0. \tag{38}$$

II. На n-й итерации, $n \geqslant 0$, при известных $p_{(n)}$, $r_{(n)}$, представляем решения задач (32)—(34) и (35)—(37) в следующем виде:

$$q_{(n)} = \overline{q}_{(n)}(x - L_k) - p_{(n)}(L_k), \tag{39}$$

$$s_{(n)} = \frac{r_{(n)}(0) - r_{(n)}(l_k^{(n)}) - V_k}{l_k^{(n)}} x + V_k - r_{(n)}(0). \tag{40}$$

Очевидно, что условия (33), (36) для функций (39), (40) выполняются. Подставив (39), (40) в условия (34), (37), получаем систему двух уравнений относительно неизвестных параметров $\overline{q}_{(n)}$ и $l_k^{(n)}$. При этом второе из уравнений будет содержать только одну неизвестную, $l_k^{(n)}$, которая может быть однозначно найдена. После этого из первого уравнения можно будет найти $\overline{q}_{(n)}$.

После нахождения $\overline{q}_{(n)}$ и $l_k^{(n)}$, мы получим окончательный вид функций $p_{(n)}$ и $s_{(n)}$ в соответствии с уравнениями (39), (40).

III. Выполнив шаг **II**, мы получаем n-ю итерацию решения задач (23)—(25) и (29)—(31):

$$u^{(n)} = p_{(n)}(x) + q_{(n)}(x), \quad v^{(n)} = r_{(n)}(v) + s_{(n)}(v). \tag{41}$$

IV. Находим следующие итерации частных решений уравнений (23) и (29). Для этого решаем уравнения

$$p''_{(n+1)} = \Phi(u^{(n)}, v^{(n)}), \quad r''_{(n+1)} = \Psi(u^{(n)}, v^{(n)}), \tag{42}$$

где

$$\Phi(u^{(n)}, v^{(n)}) = \frac{1}{u^{(n)}} \left(u_t^{(n)} - \frac{(u^{(n)\prime})^2}{\sigma} - F(u^{(n)}, v^{(n)}) \right),$$

$$\Psi(u^{(n)}, v^{(n)}) = \frac{1}{v^{(n)}} \left(v_t^{(n)} - \frac{(v^{(n)\prime})^2}{\delta} - G(u^{(n)}, v^{(n)}) \right),$$

методом коллокаций [27, 28], используя разложения правых частей по радиальным базисным функциям (РБФ) [29, 30]:

$$\Phi(u^{(n)}, v^{(n)}) = \sum_{k=1}^{K} \alpha_{n+1}^{(k)} \varphi_k(x), \quad \Psi(u^{(n)}, v^{(n)}) = \sum_{m=1}^{M} \beta_{n+1}^{(m)} \varphi_m(x). \tag{43}$$

Здесь $\varphi_k(z) = \varphi_k(|z - z_k|)$ — РБФ, z_k — точки коллокации, для каждой $\varphi_k(z)$ найдётся $\psi_k(z)$, такая что $\psi_k''(z) = \varphi_k(z)$. Расположив точки коллокации $x_1, x_2, \ldots, x_K$ на отрезке $[0, L_k]$, а точки коллокации $y_1, y_2, \ldots, y_M$ — на отрезке $[0, l_k^{(n)}]$, получаем из (43) две СЛАУ относительно коэффициентов $\alpha_{n+1}^{(k)}$, $\beta_{n+1}^{(m)}$:

$$\Phi(u^{(n)}, v^{(n)})\big|_{x=x_i} = \sum_{k=1}^{K} \alpha_{n+1}^{(k)} \varphi_k(x_i), \ i = 1, \ldots, K, \tag{44}$$

$$\Psi(u^{(n)}, v^{(n)})\big|_{x=y_j} = \sum_{m=1}^{M} \beta_{n+1}^{(m)} \varphi_m(y_j), \ j = 1, \ldots, M. \tag{45}$$

Решив системы (44), (45), получаем следующие итерации частных решений,

$$p_{(n+1)} = \sum_{k=1}^{K} \alpha_{n+1}^{(k)} \psi^{(k)}(x), \quad r_{(n+1)} = \sum_{m=1}^{M} \beta_{n+1}^{(m)} \psi^{(m)}(x),$$

после чего переходим к шагу **II**. Производные по времени в левых частях (44), (45) вычисляются методом конечных разностей. Когда n-я и $(n+1)$-я итерации достаточно близки, итерационный процесс останавливается, и в качестве решения задачи (2)—(4) в момент t_k принимаются непрерывно дифференцируемые по пространственной переменной функции

$$u(t_k, x) = p_{(n+1)}(x) + q_{(n+1)}(x), \quad v(t_k, x) = r_{(n+1)}(x) + s_{(n+1)}(x).$$

При этом будет найдено положение нулевого фронта функции v в момент t_k: $b(t_k) = l_k^{(n+1)}$.

4. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

Пример 1. Пусть в системе (2) $\sigma = \delta$, $F(u, v) = u^\lambda v^{1-\lambda}$, $G(u, v) = u^\mu v^{1-\mu}$, где $\lambda, \mu \in [0, 1]$. Тогда система имеет точное решение

$$u_1(t, x) = v_1(t, x) = \kappa e^t \left[\frac{\kappa}{\sigma}(e^t - 1) - x \right], \tag{46}$$

где $\kappa > 0$ — произвольная константа. В сделанных предположениях, с помощью предложенного выше алгоритма, была численно решена задача (2)—(4). Краевые условия были заданы в соответствии с решением (46): в условии (3) $a(t) = a_1(t) = \kappa(e^t - 1)/\sigma$, в условии (4) $g(t) = g_1(t) = \kappa^2 e^t (e^t - 1)/\sigma$. Отметим, что для данного примера выполняются все условия теоремы, кроме 4). Здесь справедливо равенство $g'(0) = \delta[a'(0)]^2$, что связано с совпадением двух нулевых фронтов (см. Замечание 1). Аналогичная ситуация имеет место в примере 2.

Исходя из вида граничных условий, в качестве критерия останова во всех примерах использовалось условие

$$\max\left\{ \left| u^{(n+1)}(0) - u^{(n)}(0) \right|, \ \left| l_k^{(n+1)} - l_k^{(n)} \right| \right\} < \varepsilon,$$

где $\varepsilon > 0$ — заданное число; в расчётах $\varepsilon = 10^{-10}$. Точность численного решения на шаге времени t_k оценивалась по наибольшему отклонению от точного решения, которое для функции u наблюдалось в точке $x = 0$, а для функции v — в точке $x = a_1(t_k)$, что соответствует виду краевых условий. Также оценивалась точность нахождения нулевого фронта функции v. Таким образом, оценивались погрешности

$$\Delta_1 = |u(t_k, 0) - u_1(t_k, 0)|, \quad \Delta_2 = |v(t_k, a_1(t_k)) - v_1(t_k, a_1(t_k))|, \quad \Delta_3 = |l_k - a_1(t_k)|. \tag{47}$$

В табл. 1 сравнивается точность численных решений при различных значениях h для следующих значений параметров задачи: $\sigma = \delta = 3$, $\lambda = \mu = 0,5$, $\kappa = 0,3$. Результаты расчётов показали хорошую точность и сходимость численного алгоритма относительно шага по времени. Отметим, что число точек коллокации, используемых при решении уравнений (42), не оказывает заметного влияния на результат, поскольку решение (46) является линейным по x.

Таблица 1

Погрешности численных решений в примере 1

t_k	h	Δ_1	Δ_2	Δ_3
0,5	0,1	$1,1 \cdot 10^{-4}$	$3,4 \cdot 10^{-4}$	$6,8 \cdot 10^{-4}$
0,5	0,05	$3,1 \cdot 10^{-5}$	$1,8 \cdot 10^{-4}$	$3,5 \cdot 10^{-4}$
0,5	0,01	$9,5 \cdot 10^{-6}$	$8,9 \cdot 10^{-5}$	$1,8 \cdot 10^{-4}$
1	0,1	$5,0 \cdot 10^{-4}$	$1,6 \cdot 10^{-3}$	$1,9 \cdot 10^{-3}$
1	0,05	$1,5 \cdot 10^{-4}$	$7,9 \cdot 10^{-4}$	$9,7 \cdot 10^{-4}$
1	0,01	$2,9 \cdot 10^{-5}$	$3,7 \cdot 10^{-5}$	$7,9 \cdot 10^{-4}$

Пример 2. Рассмотрим теперь пример, когда искомые функции не совпадают, но имеют общий нулевой фронт. Пусть в системе (2) $F(u, v) = \alpha v$, $G(u, v) = \beta u$, $\sigma = \alpha\delta$, $\alpha\beta = 1$. Тогда точное решение системы имеет вид [17]

$$u_2(t, x) = \alpha\mu(e^{2t} - e^t) - \sqrt{\alpha\sigma\mu} \cdot e^t x, \quad v_2(t, x) = \mu(e^{2t} - e^t) - \sqrt{\delta\mu} \cdot e^t x, \tag{48}$$

где $\mu > 0$ — произвольный параметр. При этом нулевые фронты функций u_2 и v_2 совпадают: $a(t) = b(t) = \sqrt{\mu/\delta}(e^t - 1)$. В краевом условии (4) в этом случае $g(t) = \mu(e^{2t} - e^t)$. Точность решения оценивалась с помощью погрешностей, аналогичных (47). Результаты расчётов при $\sigma = 2,4$, $\delta = 3$, $\alpha = 0,8$, $\beta = 1,25$, $\mu = 0,1$, приведённые в табл. 2, вновь демонстрируют сходимость алгоритма относительно шага по времени.

Таблица 2

Погрешности численных решений в примере 2

t_k	h	Δ_1	Δ_2	Δ_3
0,5	0,1	$7,0 \cdot 10^{-4}$	$1,1 \cdot 10^{-3}$	$1,2 \cdot 10^{-3}$
0,5	0,05	$2,9 \cdot 10^{-4}$	$5,8 \cdot 10^{-4}$	$6,3 \cdot 10^{-4}$
0,5	0,01	$3,4 \cdot 10^{-5}$	$1,3 \cdot 10^{-4}$	$1,5 \cdot 10^{-4}$
1	0,1	$4,2 \cdot 10^{-3}$	$5,0 \cdot 10^{-3}$	$3,4 \cdot 10^{-3}$
1	0,05	$1,8 \cdot 10^{-3}$	$2,6 \cdot 10^{-3}$	$1,7 \cdot 10^{-3}$
1	0,01	$1,9 \cdot 10^{-4}$	$5,7 \cdot 10^{-4}$	$7,9 \cdot 10^{-4}$

Пример 3. Пусть в системе (2) $F(u,v) = \alpha_1 u + \alpha_2 v$, $G(u,v) = \beta_1 u + \beta_2 v$. Тогда при значениях параметров $\sigma = 8,\ \delta = 4,913,\ \alpha_1 = 1,36,\ \alpha_2 = \beta_1 = 0,4,\ \beta_2 = 0,156$ система имеет следующее точное решение [17]

$$\begin{aligned} u_3(t,x) &= 0,629e^{0,4t} + 0,051e^{-0,4t} - 0,68(x+1)^2, \\ v_3(t,x) &= 0,629e^{0,4t} - 0,051e^{-0,4t} - 0,578(x+1)^2. \end{aligned} \tag{49}$$

В краевых условиях (3), (4) решению (49) соответствуют функции

$$a(t) = \sqrt{0,925e^{0,4t} + 0,075e^{-0,4t}} - 1, \quad g(t) = 0,629e^{0,4t} - 0,051e^{-0,4t} - 0,578.$$

Решение (49) удовлетворяет задаче (2)–(4) при $0 \leqslant x \leqslant a(t)$, поскольку $u = 0$ при $x > a(t)$. В области $x \geqslant a(t)$ для функции v можно сформулировать следующую задачу:

$$v_t = vv_{xx} + v_x^2/\delta + \beta_2 v, \quad v|_{x=a(t)} = 0,09435(e^{0,4t} - e^{-0,4t}). \tag{50}$$

Решение задачи (50) в явном виде получить невозможно, однако для тестирования предложенного в настоящей статье алгоритма можно построить численное решение с помощью верифицированного алгоритма, разработанного авторами ранее. На рис. 1(a) представлены графики численного решения, точного решения (49) и тестового решения задачи (50) при $t = 1$. Расчёты показали хорошее совпадение обеих найденных численно искомых функций с точным решением на отрезке $x \in [0, a(t)]$. В области $x > a(t)$ найденная численно функция v совпадает с тестовым решением, которое заметно отличается от точного решения (49). На рис. 1(b) для функции u проиллюстрирована сходимость итерационного процесса. В соответствии с алгоритмом, начальная итерация является линейной. Начиная с третьей итерации, численное решение графически неотличимо от точного. Заданная точность достигается при $n = 15$. Отметим, что в этом примере выполняются все условия теоремы. Таким образом, справедливо следствие, что можно видеть на рис. 1(a).

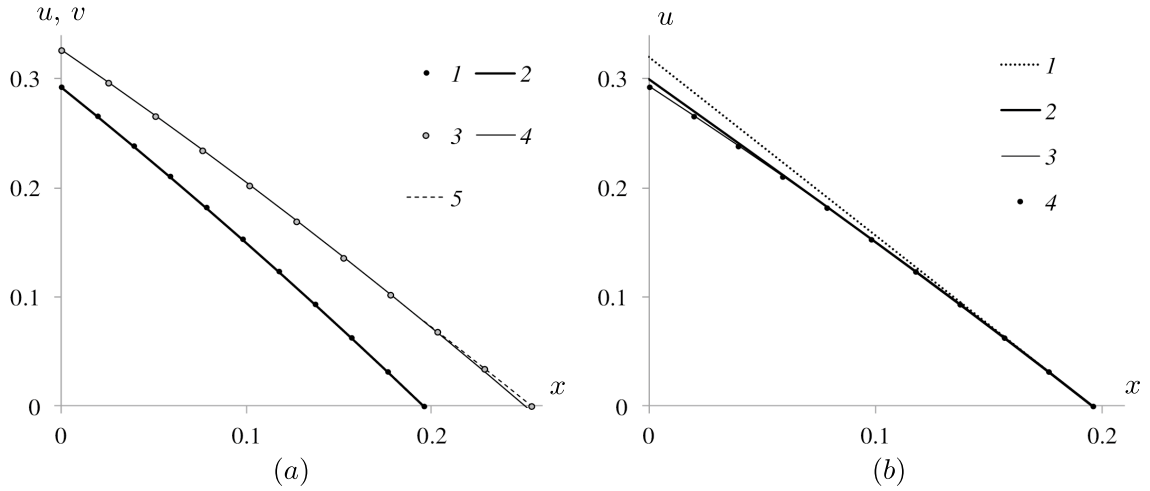


Рис. 1. Пример 3. Сравнение численного и точного решений:
(a) — решения при $t = 1$:
$u(t,x)$, численное (*1*); $u(t,x)$, точное (*2*); $v(t,x)$, численное (*3*);
$v(t,x)$, точное (*4*); $v(t,x)$, тестовое решение задачи (50) (*5*);
(b) — итерации $u^{(n)}(x)$ при $t = 1$:
$n = 0$ (*1*); $n = 1$ (*2*); $n \geqslant 2$ (*3*); точное решение (*4*)

Пример 4. В заключение проиллюстрируем оценку сходимости численного алгоритма в отсутствие известного точного решения. Пусть в задаче (2)–(4) $F(u,v) = 15uv$, $G(u,v) = 10uv$, $a(t) = e^{0.3t} - 1$, $g(t) = \ln(0.7t)$. На рис. 2, аналогично рис. 1б, графически демонстрируется достаточно быстрая сходимость итерационного процесса при $t = 1$. Заданная точность достигается при $n = 14$. Для количественного анализа сходимости алгоритма использовались невязки уравнений (2) при подстановке построенных решений:

$$\Delta_4 = \max_{x\in[0,L_k]} |u_t - uu_{xx} - u_x^2/\sigma - F(u,v)|, \quad \Delta_5 = \max_{x\in[0,l_k]} |v_t - vv_{xx} - v_x^2/\delta - G(v,u)|.$$

Представленные в табл. 3 результаты расчётов демонстрируют сходимость относительно шага по времени h и количеств точек коллокации K, M. В целом проведённый вычислительный эксперимент показал эффективность предложенного алгоритма численного решения задачи (2)–(4), машинную сходимость и хорошую точность решения.

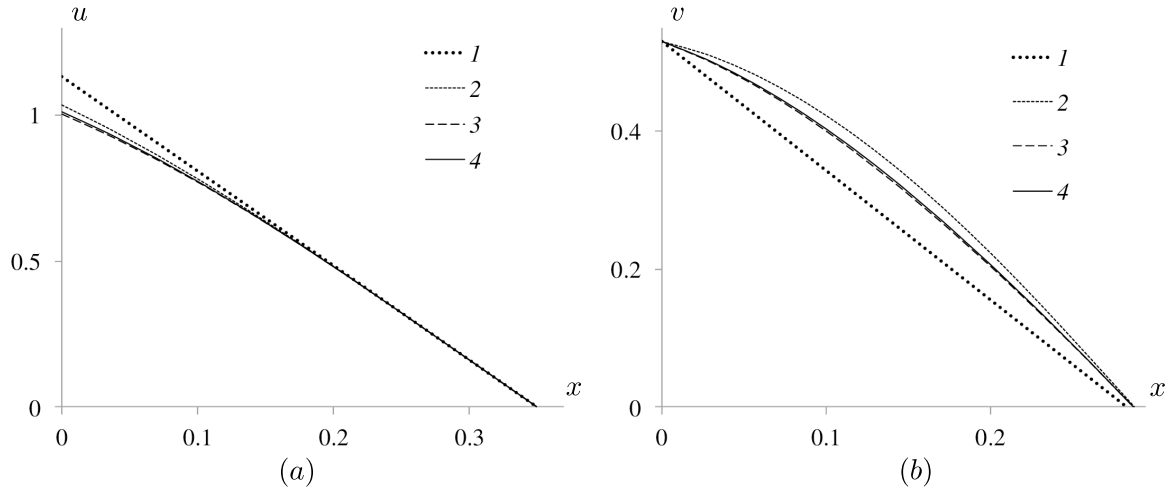


Рис. 2. Пример 4. Итерации численного решения при $t = 1$:
(a) — $v^{(n)}(x)$; (b) — $u^{(n)}(x)$:
$n = 0$ (*1*); $n = 1$ (*2*); $n = 2$ (*3*); $n \geqslant 4$ (*4*)

Таблица 3

Невязки уравнений системы (2) в примере 4, $t = 1$

h	K	M	Δ_4	Δ_5
0,1	15	10	$1,1 \cdot 10^{-2}$	$9,6 \cdot 10^{-3}$
0,1	25	20	$6,4 \cdot 10^{-3}$	$4,4 \cdot 10^{-3}$
0,1	50	40	$8,9 \cdot 10^{-3}$	$7,3 \cdot 10^{-4}$
0,05	15	10	$5,1 \cdot 10^{-3}$	$3,7 \cdot 10^{-3}$
0,05	25	20	$2,8 \cdot 10^{-3}$	$1,8 \cdot 10^{-3}$
0,05	50	40	$5,1 \cdot 10^{-4}$	$3,5 \cdot 10^{-4}$
0,01	15	10	$1,2 \cdot 10^{-3}$	$9,4 \cdot 10^{-4}$
0,01	25	20	$6,7 \cdot 10^{-4}$	$3,7 \cdot 10^{-4}$
0,01	50	40	$8,7 \cdot 10^{-5}$	$4,9 \cdot 10^{-5}$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленной работе для систем вырождающихся нелинейных параболических уравнений проведено комплексное исследование нового вида граничных задач, главной особенностью которых является принципиальное различие видов граничных условий, заданных для двух искомых функций: для одной задаётся подвижный нулевой фронт, а для другой — краевой режим в неподвижной точке. Это обстоятельство существенно осложняет как аналитическое исследование, так и построение численных решений. Насколько нам известно, такая постановка рассмотрена впервые.

В ходе исследования конструктивно доказана теорема существования и единственности аналитического решения типа диффузионной волны с построением искомых функций в виде сходящихся степенных рядов с рекуррентно определяемыми коэффициентами. Разработан алгоритм численного решения с разностной аппроксимацией по времени; на каждом шаге пространственная задача решается итерационно с использованием метода коллокаций и радиальных базисных функций. Проведённые в рамках вычислительного эксперимента расчёты продемонстрировали хорошую точность численных решений, а также численную сходимость алгоритма относительно шага по времени и числа точек коллокации.

Перспективы развития полученных результатов связаны с увеличением размерности задачи, рассмотрением более общего вида уравнений системы и краевых условий, нахождения новых классов точных решений.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках государственных заданий Института динамики систем и теории управления имени В. М. Матросова СО РАН (№ гос. регистрации 121041300058-1) и Института машиноведения имени Э. С. Горкунова УрО РАН (№ гос. регистрации 124020600042-9). 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. *Vazquez J.* The Porous Medium Equation: Mathematical Theory. Oxford: Clarendon Press, 2007.
2. *Самарский А.А., Галактионов В.А., Курдюмов С.П., Михайлов А.П.* Режимы с обострением в задачах для квазилинейных параболических уравнений. М.: Наука, 1987.
3. *Баренблатт Г.И., Ентов В.М., Рыжик В.М.* Теория нестационарной фильтрации жидкости и газа. М.: Недра, 1972.
4. *Coussy O.* Poromechanics. Chichester: Wiley and Sons, 2004.
5. *Андреев В.К., Гапоненко Ю.А., Гончарова О.Н., Пухначев В.В.* Современные математические модели конвекции. М.: Физматлит, 2008.
6. *Бекежанова В.Б., Гончарова О.Н., Овчарова А.С.* Моделирование конвекции в двухфазной системе в условиях диффузионного испарения в замкнутой области // Прикл. механика и техн. физика. 2023. Т. 64, № 4. С. 14-–26; DOI: 10.15372/PMTF202215141
7. *Grindrod P.* Patterns and Waves: Theory And Applications of Reaction-Diffusion Equations. N. Y.: Clarendon Press, 1991.
8. *DiBenedetto E.* Degenerate Parabolic Equations. N. Y.: Springer-Verl., 1993.
9. *Antontsev S., Shmarev S.* Evolution PDEs with Nonstandard Growth Conditions: Existence, Uniqueness, Localization, Blow-up. Paris: Atlantis, 2015.

10. *Сидоров А.Ф.* Избранные труды: Математика. Механика. М.: Физматлит, 2001.

11. *Баутин С.П.* Аналитическая тепловая волна. М.: Физматлит, 2003.

12. *Зельдович Я.Б., Компанеец А.С.* К теории распространения тепла при теплопроводности, зависящей от температуры // Сб., посвящённый 70-летию акад. А.Ф. Иоффе. М.: Изд-во АН СССР. 1950. С. 61–71.

13. *Баренблатт Г.И.* О некоторых неустановившихся движениях жидкости и газа в пористой среде // Прикл. математика и механика. 1952. Т. 16, вып. 1. С. 67–78.

14. *Сидоров А.Ф.* Аналитические представления решений нелинейных параболических уравнений типа нестационарной фильтрации // Докл. АН СССР. 1985. Т. 280, № 1. С. 47–51.

15. *Казаков А.Л., Кузнецов П.А., Спевак Л.Ф.* Построение решений краевой задачи с вырождением для нелинейной параболической системы // Сибирский журнал индустриальной математики. 2021. Т. 24, № 4. С. 64—78; DOI: 10.33048/SIBJIM.2021.24.405

16. *Казаков А.Л., Спевак Л.Ф.* Решения нелинейной вырождающейся системы реакция — диффузия типа диффузионных волн с двумя фронтами // Прикладная механика и техническая физика. 2022. Т. 63, № 6. С. 104–115; DOI: 10.15372/PMTF20220612

17. *Казаков А.Л., Кузнецов П.А., Спевак Л.Ф.* Задача об инициировании диффузионной волны для нелинейной параболической системы второго порядка // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. 2023. Т. 29, № 2. С. 67—86; DOI: 10.21538/0134-4889-2023-29-2-67-86

18. *Казаков А.Л., Спевак Л.Ф.* Аналитические и численные решения задачи об инициировании диффузионной волны для квазилинейной параболической системы // Прикладная механика и техническая физика. 2025. Т. 66, № 3. С. 217–229; DOI: 10.15372/PMTF202415542.

19. *Казаков А.Л., Лемперт А.А.* О существовании и единственности решения краевой задачи для параболического уравнения нестационарной фильтрации // Прикладная механика и техническая физика. 2013. Т. 54, № 2. С. 97-105.

20. *Almeida R.M.P., Duque J.C.M., Ferreira J., Robalo R.J.* Finite element schemes for a class of nonlocal parabolic systems with moving boundaries // Appl. Numer. Math. 2018. V. 127. P. 226–248; DOI: 10.1016/j.apnum.2018.01.007

21. *Clavero C., Gracia J.L.* An improved uniformly convergent scheme in space for 1D parabolic reaction–diffusion systems // Appl. Math. Comput. 2014. V. 243. P. 57–73; DOI: 10.1016/j.amc.2014.05.081

22. *Ruan W.* Wavefront solutions of degenerate quasilinear reaction–diffusion systems with mixed quasi-monotonicity // Nonlinear Analysis. 2019. Vol. 182. P. 75–96; DOI: 10.1016/j.na.2018.12.003

23. *Zhao Z., Cui H., Shen Y.* Traveling waves of a modified Holling-Tanner predator–prey model with degenerate diffusive // Zeitschrift Fur Angewandte Mathematik Und Physik. 2024. Vol. 75. Article number 205; DOI: 10.1007/s00033-024-02339-z

24. *Баутин С.П., Казаков А.Л.* Обобщённая задача Коши и её приложения. Новосибирск: Наука, 2006.

25. *Шабат А.Б., Эфендиев М.Х.* О приложениях формулы Фаа-Ди-Бруно // Уфимский математический журнал. 2017. Т. 9, № 3. С. 132–137.

26. *Курант Р.* Уравнения с частными производными. М.: Мир, 1964.

27. *Chen C.S., Chen W., Fu Z.J.* Recent Advances in Radial Basis Function Collocation Methods. Berlin, Heidelberg: Springer-Verl., 2013.

28. *Luo W.-H., Huang T.-Z., Gu X.-M., Liu Y.* Barycentric rational collocation methods for a class of nonlinear parabolic partial differential equations // Appl. Math. Lett. 2017. V. 68. P. 13-19; DOI: 10.1016/j.aml.2016.12.011

29. *Buhmann M.D.* Radial Basis Functions. Cambridge: Cambridge University Press, 2003.

30. *Fornberg B., Flyer N.* Solving PDEs with radial basis functions // Acta Numerica. 2015. V. 24. P. 215–258; DOI: 10.1017/S0962492914000130

UDC 517.957:532.529

THE PROBLEM TO DIFFUSION WAVE INITIATION FOR A REACTION-DIFFUSION SYSTEM UNDER THE MIXED BOUNDARY CONDITIONS

© 2026 **A. L. Kazakov**[1], **L. F. Spevak**[2]

[1] *Matrosov Institute for System Dynamics and Control Theory SB RAS, Lermontov st., 134, Irkutsk 664033, Russia,*
[2] *Institute of Engineering Science of UB RAS, Komsomolskaya st., 34, Ekaterinburg 620049, Russia*

E-mails: [a]kazakov@icc.ru, [b]lfs@imach.uran.ru

Received 29.12.2025, revised 21.09.2026, accepted 03.10.2026

Abstract. The paper deals with a new boundary value problem to a reaction-diffusion system of two degenerate nonlinear parabolic equations. The speciality of the problem formulation is the specification of different types of boundary conditions for two desired functions: a moving zero front is specified for one of them, and a boundary condition at a fixed point for another one. The purpose of the study is to construct solutions to the problem which have the form of diffusion waves with zero fronts. The new existence theorem of the solution in the class of analytical functions is formulated and constructively proved. A new numerical solution algorithm is proposed which is based on the collocation method and finite-difference time approximation. A computational experiment is performed to verify the algorithm. Numerical solutions are tested by the comparison with known exact solutions and by the estimation of equation residuals. The calculation results show good precision for various problem parameters, as well as the numerical convergence of the algorithm.

Keywords: nonlinear parabolic system, boundary conditions, degeneration, existence theorem, exact solution, numerical solution.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.304

REFERENCES

1. Vazquez J. The Porous Medium Equation: Mathematical Theory. Oxford: Clarendon Press, 2007.
2. Samarskii A.A., Galaktionov V.A., Kurdyumov S.P., Mikhailov A.P. Blow-up in Quasilinear Parabolic Equations. Berlin: Walter de Gruyte, 1995.
3. Barenblatt G.I., Entov V.M., Ryzhik V.M. Theory of Fluid Flows Through Natural Rocks. Dordrecht: Kluwer Academic Publ., 1990.
4. Coussy O. Poromechanics. Chichester: Wiley and Sons, 2004.
5. Andreev V.K., Gaponenko Yu.A., Goncharova O.N., Pukhnachev V.V. Mathematical models of convection. Berlin: Walter De Gruyter, 2012.
6. Bekezhanova V. B., Goncharova O. N., Ovcharova A. S. Simulation of convection in a two-phase system under conditions of diffusive evaporation in a closed region. *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, 2023, Vol. 64, No. 4, pp. 564–574; DOI: 10.1134/S0021894423040028
7. Grindrod P. Patterns and Waves: Theory And Applications of Reaction-Diffusion Equations. N. Y.: Clarendon Press, 1991.
8. DiBenedetto E. Degenerate Parabolic Equations. N. Y.: Springer-Verl., 1993.

English translation is published in Journal of Applied and Industrial Mathematics, 2026, Vol. 20, No. 3.

9. Antontsev S., Shmarev S. Evolution PDEs with Nonstandard Growth Conditions: Existence, Uniqueness, Localization, Blow-up. Paris: Atlantis, 2015.
10. Sidorov A.F. Izbrannye trudy: Matematika. Mehanika [Selected Works: Mathematics. Mechanics.]. Moscow: Fizmatlit, 2001 (in Russian).
11. Bautin S.P. Analiticheskaya teplovaya volna [Analytical heat wave]. Moscow: Fizmatlit, 2003 (in Russian).
12. Zel'dovich Ya.B., Kompaneec A.C. K teorii rasprostraneniya tepla pri teploprovodnosti, zavisyashchej ot temperatury [Regarding the theory of heat propagation in the case of temperature?dependent thermal conductivity]. *Collection dedicated to the 70th anniversary of Academician A.F. Ioffe*. Moscow: AS USSR Publ., 1950, pp. 61–71 (in Russian).
13. Barenblatt G.I. O nekotoryh neustanovivshihsya dvizheniyah zhidkosti i gaza v poristoj srede [On some unsteady flows of fluid and gas in a porous medium]. *Prikl. Mat. Mekh.*, 1952, Vol. 16, Iss. 1, pp. 67–78 (in Russian).
14. Sidorov A.F. Analytic representations of solutions of nonlinear parabolic equations of time-dependent filtration (porous medium) type. *Soviet mathematics Doklady*, 1985, Vol. 31, pp. 40-–44.
15. Kazakov A.L., Kuznetsov P.A., Spevak L.F. Construction of Solutions to a Boundary Value Problem with Singularity for a Nonlinear Parabolic System. *J. Appl. Indust. Math.*, 2021, Vol. 15, pp. 616—626; DOI: 10.1134/S1990478921040050
16. Kazakov A.L., Spevak L.F. Diffusion-wave type solutions with two fronts to a nonlinear degenerate reaction-diffusion system. *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, 2022, Vol. 63, No. 6, pp. 995-1004; DOI: 10.1134/S0021894422060128
17. Kazakov A. L., Kuznetsov P. A., Spevak L. F. The Problem of Diffusion Wave Initiation for a Nonlinear Second-Order Parabolic System. *Proc. Steklov Institute of Mathematics*, 2023, Vol. 321, No. 1, pp. 109–126; DOI: 10.1134/S0081543823030112
18. Kazakov A. L., Spevak L. F. Analytical and numerical solutions of the problem of diffusion wave initiation for a quasilinear parabolic system. *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, 2025, Vol. 66, No. 3, pp. 583-–593; DOI: 10.1007/s10958-025-07946-3
19. Kazakov A.L., Lempert A.A. Existence and uniqueness of the solution of the boundary-value problem for a parabolic equation of unsteady filtration. *J. Appl. Mech. Tech. Phys.*, 2013, Vol. 54, No. 2, pp. 251–258; DOI: 10.1134/S0021894413020107
20. Almeida R.M.P., Duque J.C.M., Ferreira J., Robalo R.J. Finite element schemes for a class of nonlocal parabolic systems with moving boundaries. *Appl. Numer. Math.*, 2018, Vol. 127, pp. 226–248; DOI: 10.1016/j.apnum.2018.01.007
21. Clavero C., Gracia J.L. An improved uniformly convergent scheme in space for 1D parabolic reaction–diffusion systems. *Appl. Math. Comput.*, 2014, Vol. 243, pp. 57–73; DOI: 10.1016/j.amc.2014.05.081
22. Ruan W. Wavefront solutions of degenerate quasilinear reaction–diffusion systems with mixed quasi-monotonicity. *Nonlinear Analysis*, 2019, Vol. 182, pp. 75–96; DOI: 10.1016/j.na.2018.12.003
23. Zhao Z., Cui H., Shen Y. Traveling waves of a modified Holling-Tanner predator–prey model with degenerate diffusive. *Zeitschrift Fur Angewandte Mathematik Und Physik*, 2024, Vol. 75, Article number 205; DOI: 10.1007/s00033-024-02339-z
24. Bautin S.P., Kazakov A.L. Obobshchyonnaya zadacha Koshi i eyo prilozheniya [The generalized Cauchy problem and its applications]. Novosibirsk: Nauka, 2006 (in Russian).
25. Shabat A. B., Efendiev M. K. On applications of Faa-Di-Bruno formula. *Ufa Math. J.*, 2017, Vol. 9, No. 3, pp. 131–136; DOI: 10.13108/2017-9-3-131]
26. Courant R., Hilbert D. Methods of Mathematical Physics. Vol. II: Partial Differential Equations. N. Y.: Interscience, 2008.
27. Chen C.S., Chen W., Fu Z.J. Recent Advances in Radial Basis Function Collocation Methods. Berlin, Heidelberg: Springer-Verl., 2013.
28. Luo W.-H., Huang T.-Z., Gu X.-M., Liu Y. Barycentric rational collocation methods for a class of nonlinear parabolic partial differential equations. *Appl. Math. Lett.*, 2017, Vol. 68, pp. 13-19; DOI: 10.1016/j.aml.2016.12.011

29. Buhmann M.D. Radial Basis Functions. Cambridge: Cambridge University Press, 2003.

30. Fornberg B., Flyer N. Solving PDEs with radial basis functions. *Acta Numerica*, 2015, Vol. 24, pp. 215–258; DOI: 10.1017/S0962492914000130

УДК 519.622

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ПРОДОЛЖЕНИЯ ПОЗВОЛЯЕТ СОКРАТИТЬ ВРЕМЯ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

© 2026 А. Л. Карчевский

Институт математики им. С. Л. Соболева СО РАН,
просп. Акад. Коптюга, 4, г. Новосибирск 630090, Россия

Поступила в редакцию 03.02.2025 г.; после доработки 03.02.2025 г.;
принята к публикации 03.10.2026 г.

Показано, что решение обратной задачи определения неизвестных параметров среды можно разделить на два этапа. Сначала предлагается решить задачу продолжения в подобласти, где параметры среды известны, а затем решить обратную задачу в подобласти, где эти параметры неизвестны и требуется их определить. Этот подход продемонстрирован на двух примерах: задаче прогнозирования разрушения дорожного покрытия и обратной динамической задаче сейсморазведки по определению упругих параметров тонкослоистого слоя. Показано, что этот подход позволяет значительно сократить время, необходимое для определения неизвестных параметров среды. В этих примерах предполагалось, что модель среды является горизонтально-слоистой. Для решения задач продолжения используется метод послойного пересчёта. Для рекурсивного пересчёта были получены выражения без накопления ошибок округления.

Ключевые слова: обратная задача, задача продолжения, остаточный функционал, горизонтально-слоистая среда.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.305

ВВЕДЕНИЕ

В работе рассматривается совместное решение задачи продолжения и решение обратной задачи по определению свойств среды. Такое совместное решение двух задач возможно, если, например, свойства среды известны в некоторой части области и неизвестны в другой. Примерами таких областей могут быть дорожное покрытие, взлётно-посадочная полоса аэродрома, верхняя часть археологического разреза и т. д. Если решить задачу продолжения до некоторой глубины, то можно получить постановку обратной задачи, которая ставится не на всей, а только на части области, причём эта часть может быть существенно меньше всей области. Предлагаемый подход демонстрируется на примере решения двух практических обратных задач.

Оптимизационный подход для решения обратной задачи является широко используемым на практике. Наверное 95% всех практических обратных задач решаются этим методом. Необходимо отметить, что оптимизационный подход к решению обратной задачи — это многократное решение прямой задачи. И в этом может скрываться основная проблема оптимизационного подхода — время решения обратной задачи существенно зависит от времени решения прямой задачи. Как пример, приведём работу [1]: время решения прямой задачи составляло 10 секунд, а время решения обратной задачи с применением оптимизационного подхода по определению трёх постоянных — 40 часов. Для ускорения вычислений можно применять различные подходы, например, применение суперкомпьютеров, но не всегда на практике это возможно. Можно применять параллельные вычисления для некоторых вычислительных этапов алгоритма решения обратной задачи. Например, для обратных задач в частотной области возможно применять естественное распараллеливание, поскольку прямая задача для каждого

параметра, которым является каждая пространственная и временная частоты, решается отдельно. В работе [2] предложен метод сопряжённого оператора, который позволяет сводить решение линейных обратных задач (например, обратные задачи по определению неизвестной правой части, начальных или краевых условий) к задаче типа проблемы моментов, для которых оптимизационный подход применим, но он не требует решения сопряжённой задачи для вычисления градиента функционала невязки. Для коэффициентных обратных задач метод сопряжённого оператора позволяет решать прямую и сопряжённую задачу параллельно, что в стандартном подходе можно было делать только последовательно. В обоих случаях (линейном и нелинейном) удаётся сократить время вычислений при оптимизационном решении обратной задачи как минимум в два раза. В предлагаемом в данной работе подходе решение задачи продолжения в подобласти, где параметры среды известны, и решение обратной задачи в подобласти, где параметры среды неизвестны, удаётся достичь сокращения времени вычислений за счёт уменьшения области (в некоторых случаях весьма существенной), в которой решается обратная задача. Необходимо отметить результаты работ [3, 4], в которых знание параметров первого слоя позволяет подавить результат многократных отражений, что облегчает решение обратной задачи с помощью стандартных средств, применяемых в современной геофизике при обработке реальных сейсмограмм. Данный аспект нами не будет рассматриваться, поскольку он требует отдельного исследования, а будет только показано к какой экономии времени вычислений может привести сокращение области, в которой решается обратная задача.

В двухмерном и трёхмерном случае задача продолжения является неустойчивой и требует применения методов регуляризации (см., например, [5]–[11]). В стационарном случае задача продолжения математически формулируются как задача Коши для эллиптического уравнения, в нестационарном — как задача для параболического или гиперболического уравнения с данными на времениподобной границе. Для численного решения задачи Коши для эллиптического уравнения предложено много различным методов численного решения (см., например, обзор во Введении в работе [12]); для численного решения уравнений с данными на времениподобной границе известны только два метода: метод оптимизации [13] и метод сопряжённого оператора [2]. Как правило, предлагаемые методы тестировались на симулированных данных. В работах [2], [14]–[16] задача Коши для эллиптического уравнения была решена для данных, полученных в ходе лабораторных экспериментов. Так же в работах [17, 18] представлено численное решение параболического уравнения с данными о времениподобной границе для обработки данных лабораторных экспериментов. Некоторые частные постановки задач продолжения можно найти в работах [19]–[21].

Предложенный в работе подход будет продемонстрирован на двух примерах: задача прогноза разрушения дорожного покрытия и обратная динамическая задача сейсмики по определению упругих параметров тонкослоистой пачки. Будет предполагаться, что модель среды является горизонтально-слоистой. В этом случае рассматриваемые обратные задачи будут одномерными, а задача продолжения будет корректной, поскольку она будет задачей Коши для дифференциального уравнения второго порядка. Для решения задачи продолжения будет использован метод послойного пересчёта.

Насколько нам известно, первым технологичным алгоритмом послойного пересчёта для решения дифференциального уравнения второго порядка для горизонтально-слоистой среды был алгоритм А.Н. Тихонова и Д.Н. Шахсуварова [22]. Однако этот алгоритм имел некоторые ограничения: аналитические выражения для расчёта искомых величин содержали экспоненты, показатели степеней которых имели положительные действительные части, что приводило к накоплению ошибок округления при послойном пересчёте. Этот недостаток был устранён в работах В.И. Дмитриева (см., например, [23, 24]). Он использовал идею прогонки, предложенную И.М. Гельфандом и О.В. Локуциевским [25]. Это позволило получить выражения для послойного пересчёта без накопления ошибок округления. В дальнейшем ме-

тод послойного пересчёта был разработан для численного решения систем дифференциальных уравнений второго порядка. В работах [26]–[28] рассмотрена система уравнений теории упругости для горизонтально-слоистых изотропных сред, в работах [29, 30] этот метод распространён на горизонтально-слоистые изотропные среды с поглощением, в работе [31] — на трансверсально-изотропные среды с осью симметрии, совпадающей с осью Oz, в работах [32, 33] — на горизонтально-слоистые среды любого типа анизотропии. Опыт работы [32, 33] позволил построить решение уравнений Максвелла для горизонтально-слоистой среды любого типом анизотропии [34], решение системы уравнений конвективного тепло- и влагопереноса [35] и решение дифференциального уравнения четвёртого порядка для поперечных колебаний кусочно-однородной балки [36]. В настоящее время метод послойного пересчёта признан наиболее подходящими для численного решения дифференциальных уравнений и систем дифференциальных уравнений второго порядка для горизонтально-слоистых сред [37] и часто используется для решения обратных задач оптимизационным методом (см., например, [38]–[50]).

Необходимо отметить, что в нашем случае метод послойного пересчёта будет применяться для решения задачи Коши, в то время как во всех вышеперечисленных случаях метод послойного пересчёта использовался для решения краевых задач. В вышеприведёных работах прогонка осуществлялась в два этапа: первый этап — вычисления прогоночных коэффициентов «снизу-вверх», второй этап — вычисление решения «сверху-вниз». В этом случае получаются выражения для рекуррентного пересчёта без накопления ошибок округления. В данной работе решения задачи продолжения, являющейся задачей Коши, осуществляется с помощью метода послойного пересчёта, вычисления ведутся так же в два этапа, но на каждом этапе «сверху-вниз», тем не менее полученые выражения позволяют осуществлять рекуррентный пересчёт без накопления ошибок округления.

1. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ РАЗРУШЕНИЯ ДОРОЖНОГО ПОКРЫТИЯ

1.1. Математическая постановка задачи

Будем считать, что рассматривается дорожное покрытие, сооружённое в соответствие со строительными нормами и эксплуатируемое в соответствии с допустимыми нагрузками. Во время эксплуатации дорожного покрытия может происходить его деформирование или разрушение в следствие природных условий, например, поднятия грунтовых вод, или техногенных явлений, например, нарушение целостности грунта или потеря его однородности (см., например, [51]), содержание в грунте крупного инородного объекта (см., например, [53]), и т. д.

Рассмотрим задачу прогнозирования разрушения дорожного покрытия как задачу определения электромагнитных параметров грунта. На рис. 1 показано типовое строение дорожного покрытия и связанная с ним модель среды.

Будем считать, что электромагнитные параметры дорожного полотна известны, требуется определить электромагнитные параметры грунта. Сухой грунт имеет соответствующую диэлектричекую проницаемость. Если влажность грунта увеличивается в следствие повышения грунтовых вод, то относительная диэлектрическая проницаемость грунта так же должна увеличиться. Если для данного типа грунта имеется корреляционная зависимость влажности от относительной диэлектрической проницаемости, то по значению относительной диэлектрической проницаемости с достаточной точностью можно определить значение влажности грунта. При критических значениях влажности для предотвращения разрушения дорожного полотна следует провести работы по влагоотведению.

Пусть электромагнитное поле возбуждается источником стороннего тока

$$j(r,\phi,z,t) = (j_r, j_\phi, j_z)^T \equiv (0, j_\phi, 0)^T, \quad j_\phi(r,z,t) = f(t)\delta(r-r_0)\delta(z-z_*),$$

индекс ^{T} означает операцию транспонирования, z_* — координата источника на оси Oz, $z_* < 0$ (источник находится в воздухе), пусть z_* достаточно мало, $r_0 > 0$ — параметр размера источника, функция $f(t)$ описывает поведение источника в зависимости от времени.

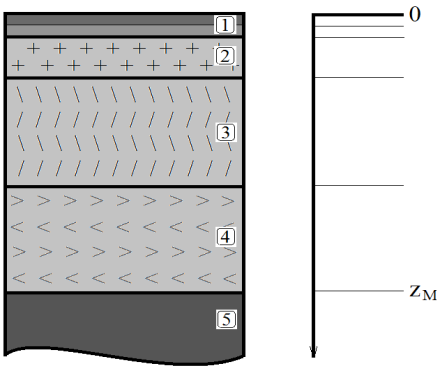


Рис. 1. (a) Типовое строение дорожного покрытия:
1 — асфальтобетон (4 см) или слой мелкозернистого асфальта (1 см)
и слой крупнозернистого асфальта (3 см), 2 — мелкий щебень (6 см),
3 — крупный щебень (25 см), 4 — щебёночно-песочная смесь (35 см), 5 — грунт.
(b) Модель среды

Считаем, что среда является изотропной, источник не зависит от угла ϕ, тогда уравнения Максвелла могут быть записаны в цилидрической системе координат, компоненты электромагнитного поля не будут зависить от угла ϕ. Учитывая вид источника, можно сказать, что только три компоненты электромагнитного поля из шести отличаются от нуля: E_ϕ, H_r и H_z (см., например, [55, 56]), и компонента E_ϕ удовлетворяет дифференциальному уравнению

$$\mu\epsilon_0\epsilon E_{\phi,tt} + \mu\sigma E_{\phi,t} = E_{\phi,zz} + E_{\phi,rr} + \frac{1}{r}E_{\phi,r} - \frac{1}{r^2}E_\phi - \mu j_{\phi,t}$$

На границах раздела слоёв z_n функции E_ϕ и $E_{\phi,z}$ остаются непрерывными. В начальный момент $t = 0$ электромагнитное поле отсутствовало. Считаем, что на поверхности произведены измерения

$$E_\phi|_{z=0} = \xi(r,t).$$

Применяя преобразование Лапласа по временной переменной t и преобразование Бесселя по пространственной переменной r, для функции $u(\nu,z,p)$, которая является образом функции $E_\phi(r,z,t)$, после некоторых упрощений и перехода к пределу $z_* \to 0$, получаем следующую постановку прямой задачи в частотной области:

$$u_{zz} - k^2 u = 0, \tag{1}$$

$$(u_z - k_0 u)|_{z=0} = \mu p f(p) g(\nu), \quad u|_{z\to\infty} = 0, \tag{2}$$

$$[u_z]_{z_n} = 0, \quad [u]_{z_n} = 0, \quad n = \overline{1,M}. \tag{3}$$

Здесь и ниже используются следующие обозначения: $f(p)$ — образ Лапласа для функции $f(t)$, $p = \gamma - i\omega$ — параметр преобразования Лапласа, γ — параметр затухания, ω — круговая временная частота, $g(\nu) = r_0 J_1(r_0\nu)$, $J_1(r)$ — функция Бесселя 1-ого порядка, $\xi(\nu,p)$ — образ функции $\xi(r,t)$, кусочно-постоянная функция $k(z) = \sqrt{\nu^2 + p^2\mu\epsilon_0\epsilon(z) + p\mu\sigma(z)}$ и $\mathrm{Re}\{k(z)\} > 0$, для n-ого слоя $k_n = \sqrt{\nu^2 + p^2\mu\epsilon_0\epsilon_n + p\mu\sigma_n}$, в воздухе $k_0 = \sqrt{\nu^2 + p^2\mu\epsilon_0}$, $\epsilon_0 = 8.854\cdot 10^{-12}$(Ф/м) — диэлектрическая проницаемость вакуума, ϵ — относительная диэлектрическая проницаемость среды (для большинства геофизических сред лежит в интервале $[1, 80]$), σ — проводимость среды (См), μ — магнитная проницаемость среды (для большинства геофизических сред $\mu = 4\pi\cdot 10^{-7}$(Гн/м)).

Может быть сформулирована обратная задача: Определить электромагнитные параметры ϵ_{M+1} и σ_{M+1} подстилающего слоя $[z_M, \infty)$, если известно, что функция $u(\nu, z, p)$ удовлетворяет постановке прямой задачи (1)–(3), имеет место дополнительная информация

$$u|_{z=0} = \xi(\nu, p), \tag{4}$$

и предполагается, что известны электромагнитные параметры ϵ_n и σ_n $(n = \overline{1, M})$.

Стандартный путь решения обратной задачи (1)–(4) — это минимизация функционала невязки

$$J[\epsilon_{M+1}, \sigma_{M+1}] = \sum_{i,k} \bigl| u|_{z=0} - \xi(\nu_i, p_k) \bigr|^2, \tag{5}$$

здесь значения параметров ν_i и $p_k = \gamma - i\omega_k$ взяты из некоторых конечных интервалов.

Поскольку при постановке обратной задачи считаются известными электромагнитные параметры ϵ_n и σ_n $(n = \overline{1, M})$, может быть рассмотрена задача продолжения электромагнитного поля: На интервале $[0, z_M]$ необходимо найти решение дифференциального уравнения (1), которое удовлетворяет данным Коши (2) и (4).

Более точно, необходимо определить величины $u_z|_{z=z_M}$ и $u|_{z=z_M}$. Знание этих величин позволит определить электромагнитные параметры грунта достаточно просто.

1.2. Решение задачи продолжения

Приведём здесь основные этапы получения величин $u_z|_{z=z_M}$ и $u|_{z=z_M}$.

Рассмотрим функции $\alpha(z)$ и $\beta(z)$, связанные с функцией $u(\nu, z, p)$ следующим соотношением:

$$u_z = \alpha u + \beta. \tag{6}$$

Подставим (6) в (1)–(3) и получим, что функции $\alpha(z)$ и $\beta(z)$ удовлетворяют следующим задачам:

$$\alpha' + \alpha^2 = k^2, \quad \alpha(0) = k_0, \quad [\alpha]_{z_n} = 0, \quad n = \overline{1, M}, \tag{7}$$

$$\beta' + \alpha\beta = 0, \quad \beta(0) = \mu p f(p) g(\nu), \quad [\beta]_{z_n} = 0, \quad n = \overline{1, M}. \tag{8}$$

Для краткости обозначим: $\alpha^n = \alpha(z_n)$, $\beta^n = \beta(z_n)$, $u_n = u(\nu, z_n, p)$.

В каждом n-ом слое решение дифференциального уравнения Риккати (7) может быть представлено в следующих видах:

$$\alpha(z) = k_n \frac{(\alpha^{n-1} + k_n) + (\alpha^{n-1} - k_n) e^{-2k_n(z - z_{n-1})}}{(\alpha^{n-1} + k_n) - (\alpha^{n-1} - k_n) e^{-2k_n(z - z_{n-1})}}, \tag{9}$$

$$\alpha(z) = k_n \frac{(\alpha^{n} + k_n) e^{2k_n(z - z_{n})} + (\alpha^{n} - k_n)}{(\alpha^{n} + k_n) e^{2k_n(z - z_{n})} - (\alpha^{n} - k_n)}, \tag{10}$$

решение дифференциального уравнения (8) может быть представлено в следующих видах:

$$\beta(z) = \beta^{n-1} e^{-\int\limits_{z_{n-1}}^{z} \alpha(x)\,dx} = \frac{2k_n e^{-k_n(z - z_{n-1})} \beta^{n-1}}{(\alpha^{n-1} + k_n) - (\alpha^{n-1} - k_n) e^{-2k_n(z - z_{n-1})}}, \tag{11}$$

$$\beta(z) = \beta^{n} e^{-\int\limits_{z_{n}}^{z} \alpha(x)\,dx} = \frac{2k_n e^{k_n(z - z_{n})} \beta^{n}}{(\alpha^{n} + k_n) e^{2k_n(z - z_{n})} - (\alpha^{n} - k_n)}, \tag{12}$$

и решение дифференциального уравнения (6) может быть получено в следующем виде:

$$u(\nu, z, p) = u_{n-1} e^{\int\limits_{z_{n-1}}^{z} \alpha(x)\,dx} + e^{\int\limits_{z_{n-1}}^{z} \alpha(x)\,dx} \int\limits_{z_{n-1}}^{z} \beta(y)\, e^{-\int\limits_{z_{n-1}}^{y} \alpha(x)\,dx} dy.$$

Используя (10) и (12), получим

$$u(\nu,z,p)=u_{n-1}\,e^{-k_n(z-z_{n-1})}\frac{(\alpha^n+k_n)e^{2k_n(z-z_n)}-(\alpha^n-k_n)}{(\alpha^n+k_n)e^{-2k_nh_n}-(\alpha^n-k_n)}$$
$$+\beta^n e^{k_n(z_n-z)}\frac{e^{-2k_nh_n}-e^{2k_n(z-z_n)}}{(\alpha^n+k_n)e^{-2k_nh_n}-(\alpha^n-k_n)}. \quad (13)$$

В соотношениях (9) и (11) вычисление функций $\alpha(z)$ и $\beta(z)$ осуществляется «сверху-вниз», а в соотношениях (10) и (12) — «снизу-вверх». Для вывода выражения (13) для вычисления функции $u(\nu,z,p)$ «сверху-вниз» необходимо использовать выражения для функций $\alpha(z)$ и $\beta(z)$, для которых вычисление производится «снизу-вверх».

Для решения задачи продолжения, т. е. для определения величин $u_z|_{z=z_M}$ и $u|_{z=z_M}$ можем организовать вычисления следующим образом:

1. Вычислим значения α^n и β^n $(n=\overline{1,M})$, используя рекуррентные соотношения

$$\alpha^0=k_0,\quad \alpha^n=k_n\frac{(\alpha^{n-1}+k_n)+(\alpha^{n-1}-k_n)e^{-2k_nh_n}}{(\alpha^{n-1}+k_n)-(\alpha^{n-1}-k_n)e^{-2k_nh_n}}, \quad (14)$$

$$\beta^0=\mu pf(p)g(\nu),\quad \beta^n=\beta^{n-1}\frac{2k_ne^{-k_nh_n}}{(\alpha^{n-1}+k_n)-(\alpha^{n-1}-k_n)e^{-2k_nh_n}}, \quad (15)$$

которые получены из соотношений (9) и (11) и условий склейки из (7) и (8).

2. Зная величины α^n и β^n $(n=\overline{1,M})$, для вычисления величин u_n $(n=\overline{1,M})$ может быть использовано (см. (13)) рекуррентное соотношение

$$u_0=\xi(\nu,p),\quad u_n=\frac{2k_n\zeta_n}{(\alpha^n+k_n)e^{-2k_nh_n}-(\alpha^n-k_n)}, \quad (16)$$
$$\zeta_n=u_{n-1}e^{-k_nh_n}-\beta^n\frac{1-e^{-2k_nh_n}}{2k_n}.$$

Таким образом, величины $u_z|_{z=z_M}=\alpha^M u_M+\beta^M$ и $u|_{z=z_M}=u_M$ вычислены.

Необходимо заметить, что в выражениях (14)–(16) присутствуют только экспоненты, у которых действительные части показателей отрицательные. Это означает, что вычисление необходимых величин и рекуррентный пересчёт будет обходится без накопления ошибок округлений.

1.3. Решение обратной задачи

Целью решения обратной задачи является определение величин ϵ_{M+1} и σ_{M+1}. Необходимо заметить, что в силу условия затухания (2) решение дифференциального уравнения (2) в подстилающем слое имеет вид $ce^{-k_{M+1}z}$. Нетрудно получить соотношение

$$(u_z+k_{M+1}u)|_{z=z_M}=0.$$

Используя данное равенство, решение задачи продолжения условия склейки в точке $z=z_M$ (3), получим равенство

$$k_{M+1}=-\frac{\beta^M}{u_M}-\alpha^M,$$

откуда следует равенство

$$p\epsilon_0\epsilon_{M+1}+\sigma_{M+1}=\chi\equiv\frac{1}{p\mu}\left[\left(\frac{\beta^M}{u_M}+\alpha^M\right)^2-\nu^2\right],$$

из которого для электромагнитных параметров подстилающего слоя нетрудно получить следующие выражения:

$$\epsilon_{M+1} = \frac{1}{\epsilon_0\,\omega}\mathrm{Im}\{\chi\}, \quad \sigma_{M+1} = \frac{\gamma}{\omega}\,\mathrm{Im}\{\chi\} - \mathrm{Re}\{\chi\}. \tag{17}$$

Таким образом, обратная задача по определению электромагнитных параметров грунта дорожного полотна решена.

1.4. Вывод

При определении относительной диэлектрической проницаемости ϵ_{M+1} и проводимости σ_{M+1} подстилающего слоя (грунта дорожного полотна) решение задачи продолжения электромагнитного поля позволило не решать обратную задачу оптимизационным методом — минимизировать функционал невязки (5), а получить аналитические формулы (17).

2. ОБРАТНАЯ ДИНАМИЧЕСКАЯ ЗАДАЧА СЕЙСМИКИ ПО ОПРЕДЕЛЕНИЮ УПРУГИХ ПАРАМЕТРОВ ТОНКОСЛОИСТОЙ ПАЧКИ

2.1. Математическая постановка задачи

В работах [57]–[61] решалась обратная динамическая задача сейсмики по определению упругих параметров тонкослоистой пачки, модель среды считалась изотропной или анизотропной, горизонтально-слоистой (см. рис. 2), обратная задача решалась в частотной области.

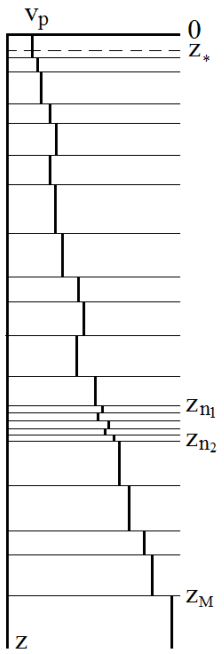


Рис. 2. Модель среды и скорость продольных волн v_p.
Тонкослоистая пачка располагается между границами z_{n_1} и z_{n_2}

Здесь рассмотрим постановки прямой и обратной задачи по определению скорости продольных волн v_p. Данные постановки получаются из общих постановок прямой и обратной задач, когда параметры преобразований Фурье по пространственным переменным равны ну-

лю. Таким образом, рассмотрим следующую постановку прямой задачи

$$\begin{gathered}\left(\rho v_p^2 u_z\right)_z - \rho p^2 u = 0,\\ \left(\rho v_p^2 u_z\right)\big|_{z=0} = 0, \quad u|_{z\to\infty} = 0,\\ \left[\rho v_p^2 u_z\right]_{z_*} = 0, \quad [u]_{z_*} = -\frac{f(p)}{\rho v_p^2}, \quad \left[\rho v_p^2 u_z\right]_{z_n} = 0,\\ [u]_{z_n} = 0, \quad n = \overline{1, M},\end{gathered} \tag{18}$$

здесь u — образ функции продольных смещений по оси Oz, ρ — плотность, $f(p)$ — образ Лапласа функции источника $f(t)$, $p = \gamma - i\omega$ — параметр преобразования Лапласа, γ — параметр затухания, ω — круговая временная частота, источник рсполагается на глубине z_* в первом слое, т. е. $0 < z_* < z_1$. Функции ρ и v_p являются кусочно-постоянными, обозначим $m = p\rho v_p$ и $k = p/v_p$, которые также будут кусочно-постоянными и в n-ом слое их постоянные значения будем обозначать m_n и k_n. Обозначим $h_n = z_n - z_{n-1}$ $(n = \overline{2, M})$, $h_1 = z_1 - z_*$.

Обратная задача. Определить скорости продольных волн $v_{p,n}$ в тонкослоистой пачке $(n = \overline{n_1 + 1, n_2})$, если известно, что функция $u(z, p)$ удовлетворяет постановке прямой задачи (18), известна дополнительная информация:

$$u|_{z=0} = \xi(p), \tag{19}$$

и предполагается, что плотность ρ известна во всей области, а скорости продольных волн $v_{p,n}$ известны в слоях с номерами $n = \overline{1, n_1}$ и $n = \overline{n_2 + 1, M + 1}$.

Стандартный путь решения обратной задачи (18)–(19) — это минимизация функционала невязки

$$J[v_{p,n_1+1}, \ldots, v_{p,n_2}] = \sum_k \big|u|_{z=0} - \xi(p_k)\big|^2, \tag{20}$$

здесь значения параметра преобразования Лапласса $p_k = \gamma - i\omega_k$ взяты из некоторых конечных интервалов.

2.2. Решение задачи продолжения

Рассмотрим функцию $\alpha(z)$, которая связаны с функцией $u(z, p)$ следующим соотношением:

$$\rho v_p^2 u_z = \alpha u. \tag{21}$$

Подставим (21) в (18), получим, что функция $\alpha(z)$ удовлетворяет следующей задаче:

$$\alpha' + \frac{1}{\rho v_p^2}\alpha^2 = \rho p^2, \quad \alpha(0) = 0, \quad [\alpha]_{z_n} = 0, \quad n = \overline{1, M}. \tag{22}$$

В каждом n-ом слое решение дифференциального уравнения Риккати из (22) может быть представлено в следующих видах:

$$\alpha(z) = m_n \frac{(\alpha^{n-1} + m_n) + (\alpha^{n-1} - m_n)e^{-2k_n(z - z_{n-1})}}{(\alpha^{n-1} + m_n) - (\alpha^{n-1} - m_n)e^{-2k_n(z - z_{n-1})}}, \tag{23}$$

$$\alpha(z) = m_n \frac{(\alpha^{n} + m_n)e^{2k_n(z - z_{n})} + (\alpha^{n} - m_n)}{(\alpha^{n} + m_n)e^{2k_n(z - z_{n})} - (\alpha^{n} - m_n)}, \tag{24}$$

решение дифференциального уравнения (21) имеет вид

$$u(z, p) = u_{n-1} e^{\frac{1}{\rho v_p^2}\int\limits_{z_{n-1}}^{z} \alpha(x)\,dx}.$$

Используя представление (24), получим

$$u(z,p)=u_{n-1}e^{-k_n(z-z_{n-1})}\frac{(\alpha^n+m_n)e^{2k_n(z-z_n)}-(\alpha^n-m_n)}{(\alpha^n+m_n)e^{-2k_nh_n}-(\alpha^n-m_n)}. \tag{25}$$

Для решения задачи продолжения вычисления могут быть организованы следующим образом:

1. Для интервала $[0,z_*]$ вычислим

$$\alpha_-^*\equiv\alpha(z_*-0)=m_1\frac{1-e^{2k_1z_*}}{1+e^{2k_1z_*}} \tag{26}$$

(см. представление (23) и краевое условие в (22)) и

$$u(z_*-0,p)=\frac{2m_1\xi(p)e^{-k_1z_*}}{(\alpha_-^*+m_1)e^{-2k_1z_*}-(\alpha_-^*-m_1)} \tag{27}$$

(см. дополнительную информацию (19) и представление (25)).

2. Из условий склейки в точке $z=z_*$ (см. (18)) следует

$$\begin{aligned}&u(z_*+0,p)=u(z_*-0,p)-\frac{f(p)}{\rho v_p^2},\\ &\alpha_+^*=\alpha_-^*\,\frac{u(z_*-0,p)}{u(z_*+0,p)}.\end{aligned} \tag{28}$$

3. Вычислим значения α^n $(n=\overline{1,n_1})$ с помощью рекуррентных соотношений

$$\alpha^0=\alpha_+^*,\quad \alpha^n=m_n\frac{(\alpha^{n-1}+m_n)+(\alpha^{n-1}-m_n)e^{-2k_nh_n}}{(\alpha^{n-1}+m_n)-(\alpha^{n-1}-m_n)e^{-2k_nh_n}}, \tag{29}$$

которые получены из (23) и условий склейки в (22).

4. Используя вычисленные α^n $(n=\overline{1,n_1})$, вычислим u_n $(n=\overline{1,n_1})$ с помощью рекуррентных соотношений

$$u_0=u(z_*+0,p),\quad u_n=\frac{2u_{n-1}m_ne^{-k_nh_n}}{(\alpha^n+m_n)e^{-2k_nh_n}-(\alpha^n-m_n)} \tag{30}$$

(см. (25)).

5. Вычислим значения α^n $(n=\overline{M,n_2+1})$, используя рекуррентные соотношения

$$\alpha^M=-m_{M+1},\quad \alpha^{n-1}=m_n\frac{(\alpha^n+m_n)e^{-2k_nh_n}+(\alpha^n-m_n)}{(\alpha^n+m_n)e^{-2k_nh_n}-(\alpha^n-m_n)} \tag{31}$$

(см. представление (24), условия склейки и условия затухания на бесконечности в (22)).

Таким образом, задача продолжения поля решена, т. е. вычислены величины $u|_{z=z_{n_1}}=u_{n_1}$ и $\rho v_p^2u_z|_{z=z_{n_1}}=\alpha^{n_1}u_{n_1}$ и получено краевое условие $\bigl(\rho v_p^2u_z-\alpha^{n_2}u\bigr)|_{z=z_{n_2}}=0$.

2.3. Решение обратной задачи

После решения задачи продолжения переформулируем прямую задачу, которая будет поставлена на меньшем интервале: на интервале $[z_{n_1},z_{n_2}]$ необходимо найти решение дифференциального уравнения

$$\bigl(\rho v_p^2u_z\bigr)_z-\rho p^2u=0, \tag{32}$$

для решения которого в точках z_n ($n = \overline{n_1+1, n_2-1}$) имеют место условия склейки

$$\left[\rho v_p^2 u_z\right]_{z_n} = 0, \quad [u]_{z_n} = 0, \tag{33}$$

и выполняются краевые условия

$$\left(\rho v_p^2 u_z\right)\big|_{z_{n_1}} = \alpha^{n_1} u_{n_1}, \quad \left(\rho v_p^2 u_z - \alpha^{n_2} u\right)|_{z=z_{n_2}} = 0. \tag{34}$$

Для нахождения неизвестных скоростей продольных волн в слоях $[z_{n-1}, z_n]$, $n = \overline{n_1+1, n_2}$, может быть сформулирована обратная задача: найти величины $v_{p,n}$, $n = \overline{n_1+1, n_2}$, если о решении прямой задачи (32)–(34) известна дополнительная информация

$$u|_{z=z_{n_1}} = u_{n_1}. \tag{35}$$

Прежде чем привести выражения для численного решения обратной задачи (32)–(35), получим выражения для решения прямой задачи (32)–(34) в точке $z = z_{n_1}$.

Рассмотрим функцию $\zeta(z)$, которая связана с функцией $u(z,p)$ следующим соотношением:

$$\rho v_p^2 u_z = \zeta u. \tag{36}$$

Подставим соотношение (36) в (32), получим, что функция $\zeta(z)$ удовлетворяет следующей задаче:

$$\zeta' + \frac{1}{\rho v_p^2}\zeta^2 = \rho p^2, \quad \zeta|_{z=z_{n_2}} = \alpha^{n_2}, \quad [\zeta]_{z_n} = 0, \quad (n = \overline{n_1+1, n_2-1}). \tag{37}$$

По рекуррентным соотношениям (см. (24)) рассчитаем величины ζ^n ($n = \overline{n_2, n_1+1}$):

$$\zeta^{n_2} = \alpha^{n_2}, \quad \zeta^{n-1} = m_n \frac{(\zeta^n + m_n)e^{-2k_n h_n} + (\zeta^n - m_n)}{(\zeta^n + m_n)e^{-2k_n h_n} - (\zeta^n - m_n)}. \tag{38}$$

После рекуррентного пересчёта (38) и использования краевого условия в точке $z = z_1$ (34) получим выражение для решения дифференциального уравнения (36) в точке $z = z_1$:

$$u|_{z=z_{n_1}} = \frac{\alpha^{n_1}}{\zeta^{n_1}} u_{n_1}. \tag{39}$$

Сравнение выражений (35) и (39) позволяет сделать вывод, что решение обратной задачи (32)-(35) эквивалентно решению обратной задачи по нахождению неизвестных значений скоростей продольных волн в слоях $[z_{n-1}, z_n]$ ($n = \overline{n_1+1, n_2}$) для постановки прямой задачи (37) с дополнительной информацией о решении

$$\zeta|_{z=z_{n_1}} = \alpha^{n_1}, \tag{40}$$

которая численно может решаться при помощи минимизации функционала невязки:

$$\Phi[v_{p,n_1+1}, \ldots, v_{p,n_2}] = \sum_{k=1}^{K} \left|\zeta^{n_1} - \alpha^{n_1}\right|^2. \tag{41}$$

Поскольку величины ζ^{n_1} и α^{n_1} зависят от параметра преобразования Лапласа p, то в (41) суммирование ведётся по индексу k для величин $p_k = \gamma - i\omega_k$, где значения ω_k выбираются из некоторого конечного интервала $[\underline{\omega}, \overline{\omega}]$. В работах [57]-[59] подробно исследовано, какое влияние на поведение функционала невязки оказывают параметры γ, $\underline{\omega}$, $\overline{\omega}$, количество K и величина шага для выбора значений ω_k из интервала $[\underline{\omega}, \overline{\omega}]$. В этих работах предложена сратегия минимизации для поиска глобального минимума у функционалов невязки, подобных функционалу (41). При минимизации следование данной стратегии является обязательным, поскольку функционал невязки (41) имеет локальные минимумы и максимумы, а предложенная стратегия позволяет обойти их и достичь точки глобального минимума.

2.4. Вывод

Данный пример решения обратной задачи показал, что, во-первых, задача продолжения может решаться не в полном объёме, поскольку можно отказаться от вычисления величины u_n на шаге 4, т. к. было показано, что постановка обратной задачи (32)–(35) эквивалентна постановке обратной задачи (37), (40), для которой требуется только вычисление дополнительной информации (40). Во-вторых, полная модель среды (см. рис. **??**) может содержать 70–80 слоёв, а модель тонкослоистой пачки может содержать всего лишь 4–5 слоёв. Поскольку, как показывают полученные выше выражения, время решения прямой задачи пропорционально зависит от количества слоёв в модели среды, поскольку используется рекурентный пересчёт со слоя на слой. Следовательно, для вышерассмотренного примера время решения прямой задачи может быть сокращено в 14–20 раз, и, следовательно, во столько же раз уменьшится время решения обратной задачи.

3. ЗАМЕЧАНИЕ

Опыт работ [32]–[36] позволяет заключить, что вышеприведённый подход может быть распространён на решения задачи продолжения и обратной задачи для системы дифференциальных уравнений следующего вида:

$$\big(AU_z + BU\big)_z + B^T U_z - DU = 0, \tag{42}$$

к которой в частотной области сводятся система дифференциальных уравнений теории упругости (см. [32, 33]), уравнения Максвелла (см. [34]) и другие (см., например, [35, 36]).

В (42) A, B и D — квадратные матрицы размерности два или три, U — двух- или трёхкомпонентный вектор-столбец, размерность которого зависит от количества уравнений в изначальной системе дифференциальных уравнений.

Для решения задачи продолжения для системы дифференциальных уравнений (42) так же могут быть получены выражения для рекуррентного пересчёта без накопления ошибок округления.

ВЫВОДЫ

Как показали вышеприведённые примеры, совместное решение задачи продолжения в той части области, где параметры среды известны, и решение обратной задачи по определению параметров среды в части области, где они неизвестны, может существенно ускорить скорость решения обратной задачи. Первый пример показал, что при определении электромагнитных параметров грунта дорожного покрытия можно отказаться от оптимизационного подхода при решении обратной задачи, поскольку после решения здачи продолжения для искомых параметров получены аналитические выражения. Второй пример показал, что время решения прямой задачи, и, следовательно, время решения обратной задачи может быть значительно уменьшено.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках государственного задания Института математики им. С. Л. Соболева СО РАН (проект FWNF-2022-0009). Других источников финансирования проведения или руководства данным конкретным исследованием не было.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Karchevsky A.L., Nazarov L.A., Nazarova L.A.* New method to interpret the 'canister test' data for determining kinetic parameters of coalbed gas: theory and experimen // Inverse Probl. Sci. En. 2021. V. 29. P. 2551–2560; DOI: 10.1080/17415985.2021.1936516
2. *Karchevsky A.L.* Reformulation of an inverse problem statement that reduces computational costs // Eurasian J. Math. Comput. Appl. 2013. V. 1. P. 4–20; https://ejmca.enu.kz/assets/files/1-2-1.pdf
3. *Fatyanov A.G.* A wave method of suppressing waves for any complex subsurface geometry // Numer. Anal. Appl. 2012. V. 5. P. 187–190; DOI: 10.1134/S1995423912020140
4. *Fatyanov A.G.* Wave method for multiple wave suppression without knowladge of a depth-velocity mediuum model // Dokl. Earth Sci. 2010 V. 435 P. 1535–1538; DOI: 10.1134/S1028334X10110279
5. *Тихонов А.Н.* Сборник научных трудов. В 10 т. М.: Наука, 2009
6. *Tikhonov A.N., Arsenin V.Y.* Solutions of Ill-Posed Problems. N. Y.: John Wiley and Sons, 1977.
7. *Lavrentiev M.M., Romanov V.G., Vasiliev V.G.* Multidimensional Inverse Problems for Differential Equations. Lecture Notes in Mathematics. V. 167. Berlin, Heidelberg, N. Y.: Springer-Verl., 1970.
8. *Lavrentiev M.M., Romanov V.G., Shishatskii S.P.* Ill-Posed Problems of Mathematical Physics and Analysis. Providence, American Mathematical Society, 1986.
9. *Vasin V.V., Ageev A.L.* Некорректно поставленные задачи с априорной информацией. Екатеринбург: Наука, 1993.
10. *Васин В.В., Еремин И.И.* Операторы и итерационные процессы типа Фейера. Теория и приложения. Москва-Ижевск, Институт компьютерных технологий, Научный центр «Регулярная и хаотическая динамика», 2005.
11. *Ягола А.Г., Яньфэй В., Степанова И.Е., Тараненко В.Н.* Обратные задачи и методы их решения. Применение в геофизике. М.:, БИНОМ, Лаборатория знаний, 2014.
12. *Sibiryakov N.E., Kochkin D.Yu., Kabov O.A., Karchevsky A.L.* Determining the heat flux density in the area of a contact line during the evaporation of liquid into a bubble // J. Appl. Ind. Math. 2023. V. 17. P. 628–639; DOI: 10.1134/S199047892303016X
13. *Belonosov A., Shishlenin M.* Regularization Methods of the Continuation Problem for the Parabolic Equation // Numerical Analysis and Its Applications, 6th Internat. Conf. NAA, 2016, P. 220–226; DOI: 10.1007/978-3-319-57099-0_22
14. *Karchevsky A.L., Marchuk I.V., Kabov O.A.* Calculation of the heat flux near the liquid-gas-solid contact line // Appl. Math. Model. 2016. V. 40. P. 1029–1037; DOI: 10.1016/j.apm.2015.06.018
15. *Cheverda V.V., Marchuk I.V., Karchevsky A.L., Orlik E.V., Kabov O.A.* Experimental investigation of heat transfer in a rivulet on the inclined foil // Thermophys. Aeromech. 2016. V. 23. P. 415–420; DOI: 10.1134/S0869864316030112
16. *Cheverda V.V., Karchevsky A.L., Marchuk I.V., Kabov O.A.* Heat flux density in the region of droplet contact line on a horizontal surface of a thin heated foil // Thermophys. Aeromech. 2017. V. 24. P. 803–806; DOI: 10.1134/S086986431705016X
17. *Karchevsky A.L.* Development of the heated thin foil technique for investigating nonstationary transfer processes // Interfacial Phenom. Heat Transf. 2018. V. 6. P. 179–185; DOI: 10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2018028949
18. *Karchevsky A.L.* Numerical solving the heat equation with data on a time-like boundary for the heated thin foil technique // Eurasian J. Math. Comput. Appl. 2020. V. 8. P. 4–14; DOI: 10.32523/2306-6172-2020-8-4-4-14
19. *Япарова Н.М.* О различных подходах к решению обратных краевых задач тепловой диагностики // Вестн. ЮУрГУ. Сер. Математика, механика, физика. 2012. Т. 7. С. 60–67.
20. *Япарова Н.М.* Численное моделирование решений обратной краевой задачи теплопроводности // Вестн. ЮУрГУ. Сер. Математическое моделирование и программирование. 2013. Т. 6. С. 112–124.
21. *Solodusha S.V., Yaparova N.M.* Numerical solving an inverse boundary value problem of heat conduction using Volterra equations of the first kind // Numer. Analys. Appl. 2015. V. 8. P. 267–274; DOI: 10.1134/S1995423915030076

22. *Тихонов А.Н., Шахсуваров Д.Н.* Метод моделирования ТЕМ полей в слоистых средах // Изв. АН СССР, сер. Геофиз. 1956. V. 3. С. 251–254.

23. *Дмитриев В.И.* Универсальный метод инверсии электромагнитного поля в слоистых средах // Выч. мет. и прогр. МГУ. 1968. Т. 10. С. 55–65.

24. *Дмитриев В.И., Федорова Е.А.* Численное моделирование электромагнитных полей в слоистых средах // Выч. мет. и прогр. МГУ. 1980. Т. 32. С. 150–183.

25. *Гельфанд И.М., Локуциевский О.В.* Метод «развертки» для решения разностных уравнений // В кн.: Годунов С.К., Рябенький В.С. Введение в теорию разностных схем. М.: Физматгиз, 1980. С. 283–309.

26. *Аккуратов Г.В., Дмитриев В.И.* Метод инверсии стационарных упругих волновых полей в слоистых средах // Численный метод в геофизике, Труды Моск. ун-та. 1979. С. 3–12.

27. *G.V. Akkuratov, V.I. Dmitriev* A method of calculating the field of steady-state elastic oscillations in a stratified medium // USSR Comput. Math. Math. Phys. 1984. V. 24. P. 166–176; DOI: 10.1016/0041-5553(84)90138-1

28. *Pavlov V.M.* A convienent technique for calculating synthetic seismograms in layered half-space // Proc. Internat. Conf. Problems of Geocosmos, St. Peteburg, 03–08 June 2002. P. 320–323.

29. *Фатьянов А.Г., Михайленко Б.Г.* Метод инверсии нестационарных волновых полей в неупругих слоистых средах // Докл. Акад. Наука СССР. 1988. Т. 301. С. 834–839.

30. *Фатьянов А.Г.* Полуаналитические решения прямых динамических задач для слоистых сред // Докл. Акад. Наука СССР. 1990. Т. 310. С. 323–327.

31. *Фатьянов А.Г.* Нестационарные волновые поля в неоднородных анизотропных средах с поглощением // Препринт 857. Вычислительный центр СО РАН, Новосибирск, 1989.

32. *Karchevsky A.L.* A numerical solution to a system of elasticity equations for layered anisotropic media // Russ. Geol. Geophys. 2005. V. 46. P. 339–351.

33. *A.L. Karchevsky* Direct dynamical problem of seismics for horizontaly stratified media // Sib. Electron. Math. Rep. 2005. V. 2. P. 23–61; http://semr.math.nsc.ru/v2/p23-61.pdf

34. *Karchevsky A.L.* A frequency-domain analytical solution of Maxwell's equations for layered anisotropic media // Russ. Geol. Geophys. 2007. V. 48. P. 689–695; DOI: 10.1016/j.rgg.2006.08.005

35. *Karchevsky A.L., Rysbayuly B.R.* Analitical expressions for a solution of convective heat and moisture transfer equations in the frequency domain for layered media // Eurasian J. Math. Comput. Appl. 2015. V. 3. P. 55–67; https://ejmca.enu.kz/assets/files/3-4-3.pdf

36. *Karchevsky A.L.* Analytical solutions to the differential equation of transverse vibrations of a piecewise homogeneous beam in the frequency domain for the boundary conditions of various types // J. Appl. Ind. Math. 2020. V. 14. P. 52–69; DOI: 10.1134/S1990478920040043

37. *Somersalo E., Cheney M., Isaacson D., Isaacson E.* Layer stripping: a direct numerical method for impedance imaging // Inverse Probl. 1991. V. 7. P. 899–926; DOI: 10.1088/0266-5611/7/6/011

38. *Karchevsky A.L.* Simultaneous reconstruction of permittivity and conductivity // J. Inverese Ill-Posed Probl. 2009. V. 17. P. 385–402; DOI: 10.1515/JIIP.2009.026

39. *Durdiev U.D.* Numerical method for determining the dependence of the dielectric permittivity on the frequency in the equation of electrodynamics with memory // Sib. Electron. Math. Rep. 2020. V. 17. P. 179–189; DOI: 10.33048/semi.2020.17.013

40. *Bozorov Z.R.* Numerical determining a memory function of a horizontallystratified elastic medium with aftereffect // Eurasian J. Math. Comput. Appl. 2020. V. 8. P. 4–16; DOI: 10.32523/2306-6172-2020-8-2-4-16

41. *Vasil'ev V.I., Kardashevsky A.M., Popov V.V.* Iterative solution of a retrospective inverse heat conduction problem with inhomogeneous dirichlet boundary conditions // J. Appl. Ind. Math. 2022. V. 16. P. 841-–852; DOI: 10.1134/S1990478922040238

42. *Vasil'ev V.I., Kardashevsky A.M.* Iterative identification of the diffusion coefficient in an initial boundary value problem for the subdiffusion equation // J. Appl. Ind. Math. 2021. V. 15. P. 343—354; DOI: 10.1134/S1990478921020162

43. *Aida-zade K.R., Rahimov A.B.* Identification of piecewise constant filtration parameters and boundaries of their constancy domains // Autom Remote Control. 2017. V. 78. P. 1404—1416; DOI: 10.1134/S0005117917080021
44. *Fatyanov A.G., Burmin V.Y.* Occurrence of precursors of pkp waves in the layered radial-symmetric Earth // Dokl. Earth Sc. 2019. V. 489. P. 1313—1317; DOI: 10.1134/S1028334X19110011
45. *Fatyanov A.G., Burmin V.Y.* The P-Wave focusing effect in a low-velocity core of the earth: analytical solution // Dokl. Earth Sc. 2018. V. 478. P. 120-–123; DOI: 10.1134/S1028334X1801021X
46. *Iskakov K.T., Boranbaev S.A., Uzakkyzy N.* Wavelet processing and filtering of the radargram trace // Eurasian J. Math. Comput. Appl. 2017. V. 5. P. 43–54; https://ejmca.enu.kz/assets/files/5-4-4.pdf
47. *Iskakov K., Sagindykov K., Mukhambetkaliyev K., Kalmenov K., Seitkhanova A.* Study of pavement anomalies using GPR of OKO-2 series // Material and Mechanical Engineering Technology. 2023. V. 4. P. 42–46; DOI: 10.52209/2706-977X_2023_4_42
48. *Iskakov K.T., Boranbaev S.A., Oralbekova Zh.O., Zhusupov T.A., Mukhambetkaliev K.K., Seytkhanova A.V.* Software for determining the geological section of the road path // Bulletin of D. Serikbaev EKTU. 2023. V. 4. P. 220–228; DOI: 10.51885/1561-4212_2023_4_220
49. *Durdiev D.K., Merajova S.B.* Inverse problem for an equation of mixed parabolic–hyperbolic type with a Bessel operator // J. Appl. Ind. Math. 2022. V. 16. P. 394-–402; DOI: 10.1134/S1990478922030036
50. *Меражова С.Б.* О численном решении обратной задачи для уравнения смешанного параболическо-гиперболического типа с целью определения правой части уравнения // Мат. заметки СВФУ. 2022. Т. 3. С. 108–127; https://cyberleninka.ru/article/n/o-chislennom-reshenii-obratnoy-zadachi-dlya-uravneniya-smeshannogo-parabolo-giperbolicheskogo-tipa-po-opredeleniyu-pravoy -chasti
51. *Smogunov V.V., Artamonov D.V., Avdeev A.A.* Analysis of road destruction mechanisms // Proc. Internat. Symposium «Reliability and Quality». 2010. V. 2. P. 103–105; https://cyberleninka.ru/article/n/analiz-mehanizmov-razrusheniy-dorog
52. *Бондарева Е.Д., Клековкина М.П.* Проектирование покрытий автомобильных и городских дорог. М.: КноРус, 2024.
53. *Zhartybayeva M., Oralbekova Zh.O., Iskakov K.T.* The interpretation of the radarograms on the basis of experimental data // Acta Phys. Pol. A. 2015. V. 128; https://api.semanticscholar.org/CorpusID:59040708
54. *Баранчук К.И., Искаков К.Т., Кренке Н.А., Миргаликизы Т.М., Модин И.Н., Хабдулина М.К.* Геофизические исследования курганов и межкурганного пространства при инженерных изысканиях для строительства // Инженерные изыскания. 2015. Т. 12. С. 34–39.
55. *Romanov V.G., Karchevsky A.L.* Determination of permittivity and conductivity of medium in a vicinity of a well having complex profile // Eurasian J. Math. Comput. Appl. 2018. V. 6. P. 64–74; DOI: 10.32523/2306-6172-2018-6-4-62-72
56. *Romanov V.G., Kabanikhin S.I.* Inverse Problems for Maxwell's Equations. VSP, Utrecht, 1994.
57. *Kurpinar E., Karchevsky A.L.* Numerical solution of the inverse problem for the elasticity system for horizontally stratified media // Inverse Probl. 2004. V. 20. P. 953-976; DOI: 10.1088/0266-5611/20/3/018
58. *Karchevsky A.L.* Numerical reconstruction of medium parameters of member of thin anisotropic layers // J. Inverese Ill-Posed Probl. 2004. V. 12. P. 519–634; DOI: 10.1515/1569394042531332
59. *Karchevsky A.L.* Analysis of solving of the inverse dynamical problem of seismics for horisontally stratified anisotropic medium // Russ. Geol. Geophys. 2006. V. 47. P. 1150–1164; https://www.researchgate.net/publication/258770524_Analysis_of_solving_of_the_inverse_dynamical_problem_of_seismics_for_horisontally_stratified_anisotropic_media
60. *Kurpinar E., Karchevsky A.L.* Finding of the elastic parameters of a horizontal (thinly stratified) anisotropic layer // Appl. Anal. 2008. V. 87. P. 1179–1212; DOI: 10.1080/00036810802378612
61. *Karchevsky A.L.* Reconstruction of pressure velocities and boundaries of thin layers in thinly-stratified layers // J. Inverese Ill-Posed Probl. 2010. V. 18. P. 371–388; DOI: 10.1515/jiip.2010.015

UDC 519.622

SOLVING THE CONTINUATION PROBLEM ALLOWS REDUCING THE TIME REQUIRED TO SOLVE THE INVERSE PROBLEM

© 2026 **A. L. Karchevsky**

Sobolev Institute of Mathematics SB RAS,
Acad. Koptyug ave., 4, Novosibirsk 630090, Russia

Received 03.02.2025, revised 03.02.2025, accepted 03.10.2026

Abstract. This paper shows that soluving an inverse problem of determining unknown parameters of the medium can be divided into two stages. First, it is proposed to solve the continuation problem into the subdomain where medium parameters are known, and then solve the inverse problem in the subdomain where these parameters are unknown and their determination is required. This approach is demonstrated using two examples: the problem of predicting the destruction of a road surface and the inverse dynamic problem of seismics to determine the elastic parameters of a thin-stratified layer. It was shown that this approach can significantly reduce the time required to determine unknown medium parameters. For these examples, it was assumed that the model of the medium is horizontally layered. To solve the problems of continuation, the method of layer-by-layer recalculation is used; for the recurrent recalculation, expressions without accumulation of rounding errors were obtained.

Keywords: inverse problem, continuation problem, residual functional, horizontally layered medium.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.205

REFERENCES

1. Karchevsky A.L., Nazarov L.A., Nazarova L.A. New method to interpret the 'canister test' data for determining kinetic parameters of coalbed gas: theory and experiment. *Inverse Probl. Sci. En.*, 2021, Vol. 29, pp. 2551–2560; DOI: 10.1080/17415985.2021.1936516
2. Karchevsky A.L. Reformulation of an inverse problem statement that reduces computational costs. *Eurasian J. Math. Comput. Appl.*, 2013, Vol. 1, pp. 4–20; https://ejmca.enu.kz/assets/files/1-2-1.pdf
3. Fatyanov A.G. A wave method of suppressing waves for any complex subsurface geometry. *Numer. Anal. Appl.*, 2012, Vol. 5, pp. 187–190; DOI: 10.1134/S1995423912020140
4. Fatyanov A.G. Wave method for multiple wave suppression without knowladge of a depth-velocity mediuum model. *Dokl. Earth Sci.*, 2010, Vol. 435, pp. 1535–1538; DOI: 10.1134/S1028334X10110279
5. Tikhonov A.N Collection of scientific works. In 10 Vol. Moscow: Nauka, 2009 (In Russian).
6. Tikhonov A.N., Arsenin V.Y. Solutions of Ill-Posed Problems. N. Y.: John Wiley and Sons, 1977.
7. Lavrentiev M.M., Romanov V.G., Vasiliev V.G. Multidimensional Inverse Problems for Differential Equations. Lecture Notes in Mathematics. Vol. 167. Berlin, Heidelberg, N. Y.: Springer-Verl., 1970.
8. Lavrentiev M.M., Romanov V.G., Shishatskii S.P. Ill-Posed Problems of Mathematical Physics and Analysis. Providence, AMS, 1986.
9. Vasin V.V., Ageev A.L. Nekorrektno postavlennye zadachi s apriornoj informaciej [Ill-posed problems with a priori information]. Ekaterinburg: Nauka, 1993 (in Russian).
10. V.V. Vasin, I.I. Eremin, Operatory i iteracionnye processy tipa Fejera. Teoriya i prilozheniya. [Operators and iteration processes of the Feyer type. Theory and applications]. [In Russian]. Moscow-Izhevsk, Institute of Computer Technologies, Research Center «Regular and Chaotic Dynamics», 2005.

English translation is published in Journal of Applied and Industrial Mathematics, 2026, Vol. 20, No. 3.

11. A.G. Yagola, V. Yanfei, I.E. Stepanova, V.N. Taranenko Obratnye zadachi i metody ih resheniya. Primenenie v geofizike. [Inverse problems and methods for their solution. Applications in geophysics]. Moscow: BINOM, Laboratoriya znanii, 2014 (in Russian).
12. Sibiryakov N.E., Kochkin D.Yu., Kabov O.A., Karchevsky A.L. Determining the heat flux density in the area of a contact line during the evaporation of liquid into a bubble. *J. Appl. Ind. Math.*, 2023, Vol. 17, pp. 628–639; DOI: 10.1134/S199047892303016X
13. Belonosov A., Shishlenin M. Regularization Methods of the Continuation Problem for the Parabolic Equation. *Numerical Analysis and Its Applications, 6th Internat. Conf.*, NAA, 2016, pp. 220–226; DOI: 10.1007/978-3-319-57099-0_22
14. Karchevsky A.L., Marchuk I.V., Kabov O.A. Calculation of the heat flux near the liquid-gas-solid contact line. *Appl. Math. Model.*, 2016, Vol. 40, pp. 1029–1037; DOI: 10.1016/j.apm.2015.06.018
15. Cheverda V.V., Marchuk I.V., Karchevsky A.L., Orlik E.V., Kabov O.A. Experimental investigation of heat transfer in a rivulet on the inclined foil. *Thermophys. Aeromech.*, 2016, Vol. 23, pp. 415–420; DOI: 10.1134/S0869864316030112
16. Cheverda V.V., Karchevsky A.L., Marchuk I.V., Kabov O.A. Heat flux density in the region of droplet contact line on a horizontal surface of a thin heated foil. *Thermophys. Aeromech.*, 2017, Vol. 24, pp. 803–806; DOI: 10.1134/S086986431705016X
17. Karchevsky A.L. Development of the heated thin foil technique for investigating nonstationary transfer processes. *Interfacial Phenom. Heat Transf.*, 2018, Vol. 6, pp. 179–185; DOI: 10.1615/InterfacPhenomHeatTransfer.2018028949
18. Karchevsky A.L. Numerical solving the heat equation with data on a time-like boundary for the heated thin foil technique. *Eurasian J. Math. Comput. Appl.*, 2020, Vol. 8, pp. 4–14; DOI: 10.32523/2306-6172-2020-8-4-4-14
19. Yaparova N.M., [On various approaches to solving inverse boundary value problems of thermal diagnostics]. *Vestn. YUUrGU. Ser. Matematika, Mehanika, Fizika* [Vestn. SUSU, Ser. Math., Mech., Phys.], 2012, Vol. 7, pp. 60–67 (in Russian).
20. N.M. Yaparova, Chislennoe modelirovanie reshenij obratnoj kraevoj zadachi teploprovodnosti [Numerical modeling of solutions to the inverse boundary value problem of heat conduction]. *Vestn. YUUrGU. Ser. Matematicheskoe modelirovanie i programmirovanie* [Vestn. SUSU, series Math. Modeling and Programming], 2013, Vol. 6, pp. 112–124 (in Russian).
21. Solodusha S.V., Yaparova N.M. Numerical solving an inverse boundary value problem of heat conduction using Volterra equations of the first kind. *Numer. Analys. Appl.*, 2015, Vol. 8, pp. 267–274; DOI: 10.1134/S1995423915030076
22. A.N. Tikhonov, D.N. Shakhsuvarov, Metod modelirovaniya TEM polej v sloistyh sredah [A method for modeling TEM fields in layered media]. *Izv. AN SSSR, ser. Geofiz.* [Izv. AN SSSR, Ser. Geofiz.], 1956, Vol. 3, pp. 251–254 (in Russian).
23. V.I. Dmitriev, [A universal method for inversion of the electromagnetic field in layered media]. *Vych. Met. Prog.* [Numerical Methods and Programming], 1968, Vol. 10, pp. 55–65 (in Russian).
24. V.I. Dmitriev, E.A. Fedorova Chislennoe modelirovanie ehlektromagnitnyh polej v sloistyh sredah [Numerical modeling of electromagnetic fields in layered media]. *Vych. Met. Prog.* [Numerical Methods and Programming], 1980, Vol. 32, pp. 150–183 (in Russian).
25. Gel'fand I.M., Lokutsievskii O.V. , Metod «razvertki» dlya resheniya raznostnyh uravnenij [The «sweep» method for solving difference equations]. In book: S.K. Godunov, V.S. Ryaben'kii, Vvedenie v Teoriyu Raznostnyh Shem [Introduction to the theory of difference schemes]. Moscow: Fizmatgiz, 1980, pp. 283–309 (in Russian).
26. G.V. Akkuratov, V.I. Dmitriev Metod inversii stacionarnyh uprugih volnovyh polej v sloistyh sredah [A method for inversion of stationary elastic wavefields in layered media]. *Chislennyj metod v geofizike, Trudy Mosk. Un-ta* [Numerical method in geophysics, Proceedings of Moscow University], 1979, pp. 3–12 (in Russian).
27. G.V. Akkuratov, V.I. Dmitriev A method of calculating the field of steady-state elastic oscillations in a stratified medium. *USSR Comput. Math. Math. Phys.*, 1984, Vol. 24, pp. 166–176; DOI: 10.1016/0041-5553(84)90138-1

28. Pavlov V.M. A convienent technique for calculating synthetic seismograms in layered half-space. *Proc. Internat. Conf. Problems of Geocosmos, St. Peteburg*, 03–08 June 2002, pp. 320–323.

29. A.G. Fatianov, B.G. Mikhailenko Metod inversii nestacionarnyh volnovyh polej v neuprugih sloistyh sredah [A method for inversion of non-stationary wave fields in non-elastic layered media]. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 1988, Vol. 301, pp. 834–839 (in Russian).

30. A.G. Fatianov Poluanaliticheskie resheniya pryamyh dinamicheskih zadach dlya sloistyh sred [Semi-analytical solutions to forward dynamic problems for layered media]. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 1990, Vol. 310, pp. 323–327 (in Russian).

31. A.G. Fatianov Nestacionarnye volnovye polya v neodnorodnyh anizotropnyh sredah s pogloshcheniem [Non-stationary wave fields in inhomogeneous anisotropic media with absorption. Preprint 857, Computing Center SB RAS, Novosibirsk, 1989 (in Russian).

32. Karchevsky A.L. A numerical solution to a system of elasticity equations for layered anisotropic media. *Russ. Geol. Geophys.*, 2005, Vol. 46, pp. 339–351.

33. A.L. Karchevsky Direct dynamical problem of seismics for horizontaly stratified media. *Sib. Electron. Math. Rep.*, 2005, Vol. 2, pp. 23–61; http://semr.math.nsc.ru/v2/p23-61.pdf

34. Karchevsky A.L. A frequency-domain analytical solution of Maxwell's equations for layered anisotropic media. *Russ. Geol. Geophys.*, 2007, Vol. 48, pp. 689–695; DOI: 10.1016/j.rgg.2006.08.005

35. Karchevsky A.L., Rysbayuly B.R. Analitical expressions for a solution of convective heat and moisture transfer equations in the frequency domain for layered media. *Eurasian J. Math. Comput. Appl.*, 2015, Vol. 3, pp. 55–67; https://ejmca.enu.kz/assets/files/3-4-3.pdf

36. Karchevsky A.L. Analytical solutions to the differential equation of transverse vibrations of a piecewise homogeneous beam in the frequency domain for the boundary conditions of various types. *J. Appl. Ind. Math.*, 2020, Vol. 14, pp. 52–69; DOI: 10.1134/S1990478920040043

37. Somersalo E., Cheney M., Isaacson D., Isaacson E. Layer stripping: a direct numerical method for impedance imaging. *Inverse Probl.*, 1991, Vol. 7, pp. 899–926; DOI: 10.1088/0266-5611/7/6/011

38. Karchevsky A.L. Simultaneous reconstruction of permittivity and conductivity. *J. Inverese Ill-Posed Probl.*, 2009, Vol. 17, pp. 385–402; DOI: 10.1515/JIIP.2009.026

39. Durdiev U.D. Numerical method for determining the dependence of the dielectric permittivity on the frequency in the equation of electrodynamics with memory. *Sib. Electron. Math. Rep.*, 2020, Vol. 17, pp. 179–189; DOI: 10.33048/semi.2020.17.013

40. Bozorov Z.R. Numerical determining a memory function of a horizontallystratified elastic medium with aftereffect. *Eurasian J. Math. Comput. Appl.*, 2020, Vol. 8, pp. 4–16; DOI: 10.32523/2306-6172-2020-8-2-4-16

41. Vasil'ev V.I., Kardashevsky A.M., Popov V.V. Iterative solution of a retrospective inverse heat conduction problem with inhomogeneous dirichlet boundary conditions. *J. Appl. Ind. Math.*, 2022, Vol. 16, pp. 841-–852; DOI: 10.1134/S1990478922040238

42. Vasil'ev V.I., Kardashevsky A.M. Iterative identification of the diffusion coefficient in an initial boundary value problem for the subdiffusion equation. *J. Appl. Ind. Math.*, 2021, Vol. 15, pp. 343—354; DOI: 10.1134/S1990478921020162

43. Aida-zade K.R., Rahimov A.B. Identification of piecewise constant filtration parameters and boundaries of their constancy domains. *Autom Remote Control*, 2017, Vol. 78, pp. 1404—1416; DOI: 10.1134/S0005117917080021

44. Fatyanov A.G., Burmin V.Y. Occurrence of precursors of pkp waves in the layered radial-symmetric Earth. *Dokl. Earth Sc.*, 2019, Vol. 489, pp. 1313—1317; DOI: 10.1134/S1028334X19110011

45. Fatyanov A.G., Burmin V.Y. The P-Wave focusing effect in a low-velocity core of the earth: analytical solution. *Dokl. Earth Sc.*, 2018, Vol. 478, pp. 120-–123; DOI: 10.1134/S1028334X1801021X

46. Iskakov K.T., Boranbaev S.A., Uzakkyzy N. Wavelet processing and filtering of the radargram trace. *Eurasian J. Math. Comput. Appl.*, 2017, Vol. 5, pp. 43–54; https://ejmca.enu.kz/assets/files/5-4-4.pdf

47. Iskakov K., Sagindykov K., Mukhambetkaliyev K., Kalmenov K., Seitkhanova A. Study of pavement anomalies using GPR of OKO-2 series. *Material and Mechanical Engineering Technology*, 2023, Vol. 4, pp. 42–46; DOI: 10.52209/2706-977X_2023_4_42

48. Iskakov K.T., Boranbaev S.A., Oralbekova Zh.O., Zhusupov T.A., Mukhambetkaliev K.K., Seytkhanova A.V. Software for determining the geological section of the road path. *Bulletin of D. Serikbaev EKTU*, 2023, Vol. 4, pp. 220–228; DOI: 10.51885/1561-4212_2023_4_220

49. Durdiev D.K., Merajova S.B. Inverse problem for an equation of mixed parabolic–hyperbolic type with a Bessel operator. *J. Appl. Ind. Math.*, 2022, Vol. 16, pp. 394-–402; DOI: 10.1134/S1990478922030036

50. Merajova S.B. O chislennom reshenii obratnoj zadachi dlya uravneniya smeshannogo parabolichesko-giperbolicheskogo tipa s cel'yu opredeleniya pravoj chasti uravneniya [On the numerical solving the inverse problem for the equation of mixed parabolic-hyperbolic type for defining the right-hand side of the equation]. *Mat. Zametki SVFU*, 2022, Vol. 3, pp. 108–127 (in Russian); https://cyberleninka.ru/article/n/o-chislennom-reshenii-obratnoy-zadachi-dlya-uravneniya-smeshannogo-parabolo-giperbolicheskogo-tipa-po-opredeleniyu-pravoy-chasti

51. Smogunov V.V., Artamonov D.V., Avdeev A.A. Analysis of road destruction mechanisms. *Proc. Internat. Symposium «Reliability and Quality»*, 2010, Vol. 2, pp. 103–105; https://cyberleninka.ru/article/n/analiz-mehanizmov-razrusheniy-dorog

52. E.D. Bondareva, M.P. Klekovkina Proektirovanie pokrytij avtomobil'nyh i gorodskih dorog [Design of Pavements for Highways and Urban Roads]. Moscow: KnoRus, 2024 (in Russian).

53. Zhartybayeva M., Oralbekova Zh.O., Iskakov K.T. The interpretation of the radarograms on the basis of experimental data. *Acta Phys. Pol. A*, 2015, Vol. 128; https://api.semanticscholar.org/CorpusID:59040708

54. Baranchuk K.I., Iskakov K.T., Krenke N.A., Mirgalikyzy T.M., Modin I.N., Khabdulina M.K. Geofizicheskie issledovaniya kurganov i mezhkurgannogo prostranstva pri inzhenernyh izyskaniyah dlya stroitel'stva [Geophysical studies of mounds and intermound space during engineering surveys for construction], *Inzhenernye Izyskaniya* [Engineering Surveys], 2015, Vol. 12, pp. 34–39(in Russian).

55. Romanov V.G., Karchevsky A.L. Determination of permittivity and conductivity of medium in a vicinity of a well having complex profile. *Eurasian J. Math. Comput. Appl.*, 2018, Vol. 6, pp. 64–74; DOI: 10.32523/2306-6172-2018-6-4-62-72

56. Romanov V.G., Kabanikhin S.I. Inverse Problems for Maxwell's Equations. VSP, Utrecht, 1994.

57. Kurpinar E., Karchevsky A.L. Numerical solution of the inverse problem for the elasticity system for horizontally stratified media. *Inverse Probl.*, 2004, Vol. 20, pp. 953-976; DOI: 10.1088/0266-5611/20/3/018

58. Karchevsky A.L. Numerical reconstruction of medium parameters of member of thin anisotropic layers. *J. Inverese Ill-Posed Probl.*, 2004, Vol. 12, pp. 519–634; DOI: 10.1515/1569394042531332

59. Karchevsky A.L. Analysis of solving of the inverse dynamical problem of seismics for horisontally stratified anisotropic medium. *Russ. Geol. Geophys.*, 2006, Vol. 47, pp. 1150–1164; https://www.researchgate.net/publication/258770524_Analysis_of_solving_of_the_inverse_dynamical_problem_of_seismics_for_horisontally_stratified_anisotropic_media

60. Kurpinar E., Karchevsky A.L. Finding of the elastic parameters of a horizontal (thinly stratified) anisotropic layer. *Appl. Anal.*, 2008, Vol. 87, pp. 1179–1212; DOI: 10.1080/00036810802378612

61. Karchevsky A.L. Reconstruction of pressure velocities and boundaries of thin layers in thinly-stratified layers. *J. Inverese Ill-Posed Probl.*, 2010, Vol. 18, pp. 371–388; DOI: 10.1515/jiip.2010.015

УДК 532.5:519.6

ВАЛИДАЦИЯ ПАКЕТА ПРОГРАММ «ЛОГОС» НА ЗАДАЧАХ ДИНАМИКИ И ТЕПЛООБМЕНА В ДВУХФАЗНЫХ СРЕДАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ОДНОСКОРОСТНОЙ МНОГОФАЗНОЙ МОДЕЛИ ЖИДКОСТИ СО СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТЬЮ

© 2026 А. С. Козелков[1,4a], А. Ю. Пузан[1,3b], И. В. Лаптев[2c], В. В. Курулин[1,4] , А. А. Куроедов[2], А. О. Городнов[2]

[1] *Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, г. Саров 607188, Россия,*
[2] *АО Государственный научный центр «Центр Келдыша», г. Москва 125438, Россия,*
[3] *Саровский филиал МГУ им. М. В. Ломоносова, г. Саров 607328, Россия,*
[4] *Нижегородский государственный технический университет им. Р. Е. Алексеева, г. Нижний Новгород 603155, Россия*

E-mails: [a]askozelkov@mail.ru, [b]pppan@yandex.ru, [c]laptev.iv.kerc@gmail.com

Поступила в редакцию 14.01.2026 г.; после доработки 26.05.2026 г.; принята к публикации 15.07.2026 г.

Представлены результаты валидации российского пакета программ «Логос» на задачах динамики и теплообмена в двухфазных средах. Двухфазное течение моделируется на основе решения системы уравнений Навье — Стокса, межфазная граница учитывается посредством односкоростной многофазной модели жидкости VOF. Система уравнений решается методом Simple, реализованном на базе конечно-объёмной дискретизации для неструктурированных расчётных сеток. Базис валидационных задач разбит на два класса: задачи динамики границы раздела фаз и задачи сопряжённого тепломассообмена в двухфазных средах. Базис содержит девять задач, для которых доступны эталонные аналитические или экспериментальные данные по ключевым физическим параметрам задачи. Целью валидации программного пакета «Логос» было подтверждение его способности адекватно описывать динамику и теплообмен в двухфазных средах, а также обеспечение высокой точности результатов моделирования. В рамках исследования для различных классов задач были получены следующие осреднённые значения относительной погрешности: для задач исследования динамики границы раздела фаз усреднённая относительная погрешность лежит в диапазоне от 0,7% (амплитуда уровня воды в задаче о колебании воды в резервуаре под действием силы тяжести), до 25% (амплитуда уровня воды в задаче о плескании жидкости в качающейся ёмкости); для задач сопряжённого тепломассообмена в двухфазных средах погрешность в диапазоне от 0,14% (скорость распространения возмущений в задаче о распространении малых возмущений в смеси), до 6% (положение границы раздела фаз в задаче о движении межфазной границы за счёт испарения). Исследования показали, что пакет программ «Логос» позволяет корректно воспроизводить основные физические явления и процессы, характерные для течений двухфазных сред в присутствии границы раздела с допустимой для данного класса задач погрешностью.

Ключевые слова: гидродинамика, уравнения Навье — Стокса, многофазность, VOF, свободная поверхность, массообмен, теплообмен

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.306

ВВЕДЕНИЕ

Современная космонавтика и аэрокосмическая отрасль динамично развиваются, что влечёт за собой необходимость постоянного улучшения конструкций летательных аппаратов и обеспечения надёжности и безопасности их функционирования. Для решения задач гидрогазодинамики и теплообмена в двухфазных средах актуальным является использование современных методов вычислительной гидродинамики [1, 2]. Эти методы позволяют получать глубокое понимание процессов, происходящих в таких сложных системах, и могут быть применены для проектирования, анализа и оптимизации различных элементов ракетно-космической техники [2]. В настоящее время существует значительное количество программных комплексов, предназначенных для решения задач гидрогазодинамики и теплообмена. Среди отечественных комплексов в высокотехнологичных областях промышленности широко применяется пакет программ «Логос» [3, 4]. При этом для обеспечения корректного моделирования физических процессов и предсказания поведения многофазных потоков, повышенные требования предъявляются к точности, надёжности и эффективности моделей, реализованных в программном коде. С целью тестирования и доработки реализованных подходов, а также подтверждения высокой точности, стабильности и достоверности используемых численных моделей проводят верификацию и валидацию программных комплексов. В процессе разработки и развития пакет программ «Логос» постоянно успешно валидируется на задачах различных классов для моделирования ламинарных и турбулентных течений, решения задач судостроительной отрасли [5], задач аэрогазодинамики старта и полёта ракет-носителей, а также многофазных течений с учётом свободной поверхности [6]. В настоящее время валидационный базис содержит несколько десятков задач различных классов. Данная работа является логическим продолжением валидационных расчётов на задачах динамики и теплообмена в двухфазных средах с учётом свободной поверхности. Базис задач можно разделить на две группы: в первую группу входят задачи, направленные на подтверждение корректности моделирования движения свободной поверхности жидкости в условиях переменной перегрузки, для точного воспроизведения положения топлива в баке летательных аппаратов; во второй группе собраны задачи для валидации моделей теплового взаимодействия жидкой и газовой фазы, в том числе, с учётом фазовых переходов.

1. ОСНОВНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ЧИСЛЕННАЯ СХЕМА

В пакете программ «Логос» используется подход Эйлера [7], в рамках которого можно выделить две модели. Наиболее полно динамику многофазной жидкости с учётом свободной поверхности позволяет описать Эйлер — Эйлерова многоскоростная модель [8], в которой для каждой фазы отдельно решаются уравнения движения и неразрывности. При этом каждая фаза имеет свою скорость, общее давление, а для расчёта объёма, который она занимает в пространстве, вводится уравнение переноса объёмной доли. Такая модель сложна в реализации, требует точных замыкающих соотношений при записи уравнений [9], а также значительных вычислительных ресурсов. Указанная модель используется достаточно редко в основном для задач пузырьковых потоков [10]. На практике наиболее распространённой методом является VOF (Volume of Fluid), где в качестве маркер-функции выступает объёмная доля жидкости [11]. Этот метод представляет собой упрощённую версию модели Эйлер — Эйлер, где общий набор уравнений движения и неразрывности решается для всех фаз. Для каждой фазы также решается отдельное уравнение переноса объёмной доли. Метод VOF позволяет корректно описывать потоки со свободной поверхностью, включая сложные процессы, такие как стратифицированные потоки, плескание жидкости, заполнение или опорожнение резервуаров, движение газовых пузырей в жидкости. Эта модель обладает меньшими требованиями к вычислительным ресурсам по сравнению с более сложной моделью Эйлер — Эйлер и может эффективно применяться на различных неструктурированных сетках. Также встречаются модификации

методик, в которых фиксируя границу раздела жидкой и газовой фаз теплообмен и гидродинамические процессы рассчитываются решением системы уравнений Навье-Стокса отдельно в жидкой и отдельно в газовой фазах, сопрягая решение в части тепло- и массообмена на границе раздела в итерационной процедуре [12].

Движение многофазной среды со свободной поверхностью в односкоростном приближении с учётом межфазного обмена описывается с помощью системы уравнений Навье — Стокса, которые дополняются уравнениями переноса объёмной доли жидкой и парообразной фаз [13]:

$$\begin{gathered}
\nabla \cdot \vec{u} = \dot{m}\left(\frac{1}{\rho_l} - \frac{1}{\rho_\nu}\right), \\
\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho\vec{u} \otimes \vec{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla\vec{u} + \nabla\vec{u}^T)] + \rho\vec{g} + \vec{F}_{st}, \\
\frac{\partial(\rho C_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho C_p T\vec{u}) = \nabla(\lambda\nabla T) + \dot{m}h_{\nu l}, \\
\frac{\partial\alpha_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_l\vec{u}) = \frac{\dot{m}}{\rho_l}, \\
\frac{\partial\alpha_\nu}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_\nu\vec{u}) = -\frac{\dot{m}}{\rho_\nu},
\end{gathered} \tag{1}$$

где $\rho, \vec{u}, T, p$ — это, соответственно, плотность, скорость, температура и давление среды, μ, λ, C_p — это вязкость, коэффициент теплопроводности и теплоёмкость многофазной среды, $\vec{g}$ — вектор ускорения свободного падения, t — время, $\alpha_k = V_k/V$ — объёмная доля k-й фазы, ρ_k — плотность k-й фазы. Индекс k обозначает одну из фаз: l — жидкая фаза, v — пар. Фазы рассматриваются несжимаемыми, со следующими свойствами:

$$\rho = \sum_{k=1}^{N} \rho_k\alpha_k, \quad \mu = \sum_{k=1}^{N} \mu_k\alpha_k, \quad C_p = \sum_{k=1}^{N} \frac{C_{p,k}\rho_k}{\rho}\alpha_k, \quad \lambda = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k\alpha_k.$$

При наличии фазовых переходов объёмный поток массы через межфазную границу может быть вычислен следующим образом [14]:

$$\dot{m} = \frac{2\gamma}{2-\gamma}\left(\frac{M}{2\pi R_g}\right)^{1/2} \frac{\rho_\nu h_{\nu l}}{T_{\text{sat}}^{3/2}}(T - T_{\text{sat}})|\nabla\alpha_l|,$$

где h_{lv} — скрытая теплота парообразования, γ — коэффициент конденсации/испарения, M — молекулярная масса, Rg — универсальная газовая постоянная, T_{sat} — температура насыщения при заданном давлении. В задачах расчёта движения межфазной границы также необходимо учитывать силы поверхностного натяжения $\vec{F}_{\text{st}}$, которые будут стремится сглаживать поверхность раздела фаз. Для учёта силы поверхностного натяжения в уравнении сохранения импульса используется модель непрерывной поверхностной силы [15]. В рамках этой модели рассматривают нормальную составляющую силы, а тангенциальной пренебрегают. Коэффициент поверхностного натяжения вдоль поверхности раздела фаз не меняется. В таком приближении сила поверхностного натяжения может быть представлена как непрерывная объёмная сила, действующая на межфазной границе в переходной области:

$$\vec{F}_{\text{st}} \approx \sigma\text{k}\nabla\alpha_i,$$

здесь σ — коэффициент поверхностного натяжения, $k = -\nabla \cdot \left(\frac{\nabla\alpha_i}{|\nabla\alpha_i|}\right)$ — кривизна поверхности раздела фаз.

Для течений со свободной поверхностью, рассматриваемых в рамках данной статьи, целесообразно применение модели турбулентности Ментера SST [16]. Она представляет собой гибридную RANS модель. Данная модель реализована в пакете программ «Логос», верифицирована и наиболее широко применяется для решения инженерных задач.

Для численного решения системы уравнений (1) необходимо задать граничные условия. Для исследуемого класса задач обязательно наличие непроницаемых стенок, ограничивающих поток жидкости. На стенках задаётся условие равенства нулю градиентов давления и объёмной доли:

$$\frac{\partial p}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial \alpha_l}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial \alpha_v}{\partial n} = 0,$$

значение компонент скорости равно нулю:

$$u = 0, \quad v = 0, \quad w = 0.$$

Для учёта теплообмена потока жидкости со стенкой необходимо задать на стенке температуру или тепловой поток:

$$T = T_\Sigma(\vec{R}, t), \quad (\overrightarrow{R}, t) \in \Sigma,$$

где $T_\Sigma(\vec{R}, t)$ — распределение температуры на границе.

$$-(\chi \frac{\partial T}{\partial n}) = q_\Sigma(\vec{R}, t),$$

где $q_\Sigma(\overrightarrow{R}, t)$ — поток тепла в направлении внешней нормали к поверхности Σ, χ — коэффициент теплопроводности.

На выходе из расчётной области или на открытой границе фиксируется требуемое статическое давление, градиенты скорости и объёмных долей равны нулю:

$$\frac{\partial u}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial v}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial w}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial \alpha_l}{\partial n} = 0, \quad \frac{\partial \alpha_v}{\partial n} = 0, \quad P_{\text{stat}} = \text{const}\,.$$

В пакете программ «Логос» используется метод конечных объёмов на произвольных неструктурированных сетках [17]. Данный метод основан на применении закона сохранения для некоторой скалярной величины, записанного в интегральной форме. Для произвольно выбранного объёма конечного размера справедливо следующее утверждение: изменение скалярной величины выражается через поток этой величины через поверхность, ограничивающую указанный объём, и источник или сток этой величины внутри объёма. Конечно-объёмную схему дискретизации уравнений переноса рассмотрим на примере уравнения переноса произвольной скалярной величины φ [18] :

$$\frac{\partial \rho\varphi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\varphi u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j}\tau_j + Q. \tag{2}$$

Первое слагаемое в уравнении (2) представляет собой нестационарное слагаемое и описывает изменение величины с течением времени; второй — конвективное слагаемое, третий — диффузионное слагаемое; четвёртый — источниковое слагаемое, описывающее источники или стоки величины в объёме. Тензор τ_j содержит пространственные производные от искомой величины φ. Для простоты примем, что $\tau_j = \mu \dfrac{\partial \varphi}{\partial x_j}$.

Процесс решения уравнения (2) методом конечных объёмов можно разбить на два этапа [19]: на первом этапе проводится пространственная дискретизация расчётной области, на втором — составление и численное решение дискретного аналога для уравнения (2). Этап пространственной дискретизации подразумевает разбиение расчётной области на непересекающиеся ячейки произвольной формы. Этап составления и численного решения дискретного

аналога для дифференциального уравнения (2) подразумевает проведение интегрирования уравнения по пространству и времени. Проинтегрировав уравнение переноса скалярной величины φ по объёму V_p в некоторой точке P и применив к полученному выражению теорему Остроградского Гаусса переходят от интегралов по объёму к поверхностным интегралам для конвективного и диффузионного слагаемых:

$$\int\limits_{V_P} \frac{\partial \rho\varphi}{\partial t}\, dV + \int\limits_{S_P} \rho\varphi u_j dS_j - \int\limits_{S_P} \mu \frac{\partial \varphi}{\partial x_j}\, dS_j - \int\limits_{V_P} Q\, dV = 0,$$

где V_P — объём ячейки P; S_P — поверхность ячейки P.

Далее необходимо получить дискретные аналоги для объёмных и поверхностных интегралов, а также для производной по времени и градиента.

Дискретный аналог нестационарного слагаемого в данной работе рассчитывается неявным методом по схеме Эйлера [20]:

$$\frac{\rho^{j+1}\varphi^{j+1} - \rho^j\varphi^j}{\Delta t} + \left[\frac{\partial}{\partial x_j}(\rho\varphi u_j) - \frac{\partial}{\partial x_j}\tau_{ij} - Q\right]^{j+1} = 0,$$

где j — номер шага по времени, Δt — шаг по времени.

Дискретный аналог конвективного слагаемого записывается в следующем виде:

$$\int\limits_{S_P} \rho\varphi u_j dS_j \approx \sum_k \rho_k\varphi_k u_{j,k} S_{j,k} \approx \sum_k \rho_k\varphi_k F_k,$$

где $S_{j,k}$ — вектор-площадь грани, F_k — объёмный поток через грань. Известно большое количество схем дискретизации конвективных потоков [21], в данной работе используется сжимающая схема HRIC [21].

Дискретный аналог диффузионного слагаемого записывается в следующем виде [20]:

$$\int\limits_{S_P} \mu \frac{\partial \varphi}{\partial x_j}\, dS_j \approx \sum_k \left(\mu \frac{\partial \varphi}{\partial x_j}\right)_k S_{j,k} = \sum_k \mu_k \left(\frac{\partial \varphi}{\partial n_k}\right)_k |S_k|,$$

где n_k — нормаль грани k.

Градиент на грани вычисляется одним из известных методов, например, методом Грина — Гаусса:

$$\left(\frac{\partial \varphi}{\partial x_i}\right)_P = \nabla\varphi_P = \frac{1}{V_P}\sum_k \varphi_k S_{k,i}.$$

Дискретизация источникового слагаемого выполняется следующим образом:

$$\int\limits_{V_P} Q\, dV = Q_P V_P.$$

Учитывая описанную выше дискретизацию, уравнение (2) заменяется системой линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), записанных для каждой расчётной ячейки:

$$A_P\varphi_P + \sum_{k_{int}} A_{k,int}\varphi_{Mk,int} = R_{i,P}.$$

В работе для решения полученной СЛАУ используется алгоритм SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) [4, 21], основанный на использовании полунеявной схемы

с расщеплением по физическим процессам. Записанная в таком виде математическая модель реализована в пакете программ «Логос» [5, 6].

Для всех задач валидационного базиса были проведены исследования на сеточную сходимость. По результатам этих исследований была выбрана оптимальная сеточная модель, обеспечивающая высокую точность расчётов. Для выбора оптимальной сеточной модели были использованы следующие критерии: сходимость решения, обеспечивавшая устойчивость и минимальные изменения параметров (менее 5%) при уточнении сетки; разрешение свободной поверхности, необходимое для корректного воспроизведения волновых процессов; точность воспроизведения экспериментальных данных по ключевым параметрам; экономичность модели, позволяющая достичь приемлемой точности с минимальными вычислительными затратами; численная стабильность расчётов без осцилляций и нестабильностей. В связи с тем, что валидационный базис содержит большое количество задач, а объём научной статьи ограничен, в данной работе не приводится описание проведённых исследований сеточной сходимости.

2. ЗАДАЧИ ДИНАМИКИ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ФАЗ

Задачи данного типа являются распространёнными при исследованиях поведения жидких компонентов топлив в баках космических и летательных аппаратов в условиях переменных перегрузок, которые возникают при движении и маневрировании изделий [23]. Как правило, такие задачи рассматриваются в изотермическом приближении, а определяемой величиной являются амплитуда и частота колебаний границы раздела жидкой и газовой фаз. В нижеописанных задачах все используемые сеточные модели построены в пакете программ «Логос».

2.1. Колебания воды в резервуаре под действием силы тяжести

Постановка задачи 2.1. В качестве первой задачи рассматриваются колебания воды в резервуаре под действием силы тяжести [24]. Принципиальная схема задачи приведена на рис. 1. В начальный момент времени граница раздела фаз имеет форму половины длины гармонической волны с амплитудой 0,005 м относительно уровня 0,05 м. На левую, правую и нижнюю стенки накладывается граничное условие прилипания потока, на переднюю и заднюю стенку — условие симметрии, сверху фиксируется статическое давление P = 0 Па. Плотности воды и воздуха принимались равными $\rho_w = 1000$ кг/м^3 и $\rho_a = 1$ кг/м^3.

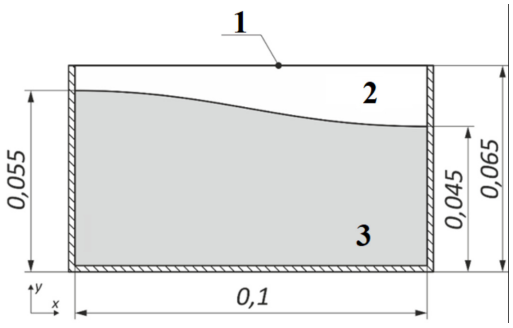


Рис. 1. Схема расчётной области:
1 — открытая граница; 2 — воздух; 3 — вода

Результаты валидации 2.1. Для проведения численного моделирования использовалась однородная структурированная сеточная модель с количеством ячеек по осям x и y равным 160 и 104 соответственно. На рис. 2 приведена зависимость колебания уровня жидкости у левой стенки резервуара от времени. Видно, что численные результаты дают хорошее качественное и количественное согласование с теорией и численным решением, приведённым в работе [24]. Усреднённая относительная погрешность расчётных значений уровня воды от эталонных данных составляет около 0,7%.

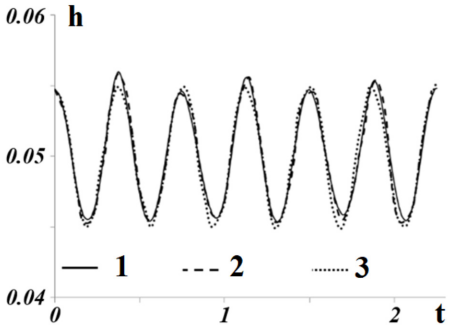


Рис. 2. Колебания уровня жидкости h (м) от времени T (сек) у левой стенки резервуара:
1 — «Логос»; 2 — Ubbink; 3 – Cos

2.2. Плескание жидкости в качающейся ёмкости

Постановка задачи 2.2. В качестве второй задачи рассматривается плескание жидкости в качающейся ёмкости, представляющей собой прямоугольный параллелепипед (см. рис. 3). Результаты экспериментального исследования данной задачи приведены в работе [25]. В нижней части ёмкости находится вода с плотностью $\rho_w = 998$ кг/м^3 и вязкостью $\mu_w = 1 \cdot 10^{-3}$ Па$\cdot$ с, а в верхней части — воздух с плотностью $\rho_a = 0.0017$ кг/м^3 и вязкостью $\mu_a = 8.9 \cdot 10^{-6}$ Па$\cdot$ с.

Уровень заполнения резервуара h отсчитывается от дна. В начальный момент времени вектор нормали к основанию ёмкости совпадает с направлением вектора силы тяжести. В дальнейшем осуществляется качание резервуара по гармоническому закону с угловой частотой ω и угловой амплитудой φ_0 относительно оси, проходящей через центр донной части ёмкости и параллельной оси z.

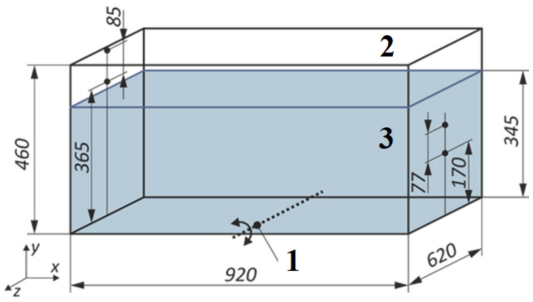


Рис. 3. Схема расчетной области и расположение датчиков (размеры указаны в мм):
1 — ось вращения; 2 — воздух; 3 — вода

Результаты валидации 2.2. В расчётной области задаются два региона, соответствующие жидкости и газу, внешними границами для обоих регионов выступает твёрдая стенка без проскальзывания. Смежная граница регионов задаётся через внутренний интерфейс. Течение в ёмкости предполагается ламинарным, влиянием сил поверхностного натяжения пренебрегается. Процесс колебания резервуара реализуется в ПП «Логос» с использованием объёмных источников, задание которых позволяет моделировать движение в неинерциальной системе отсчёта. Валидация осуществляется с использованием результатов экспериментов, представленных в [25], на серии расчётов, в которых варьируется угловая амплитуда колебаний при частоте колебаний $\nu = 2$ рад/с. Сравнение ведётся по показаниям датчиков избыточного давления, расположение которых представлено на рис. 3. На рис. 4 приведены экспериментальные и расчётные графики избыточного давления при $\varphi_0 = 4°$ и $\varphi_0 = 8°$.

Для $\varphi_0 = 4°$ максимальное отклонение расчётных значений амплитуды давления от эталонных составляет от 10% до 25% в зависимости от расположения датчика. Для угла $\varphi_0 = 8°$

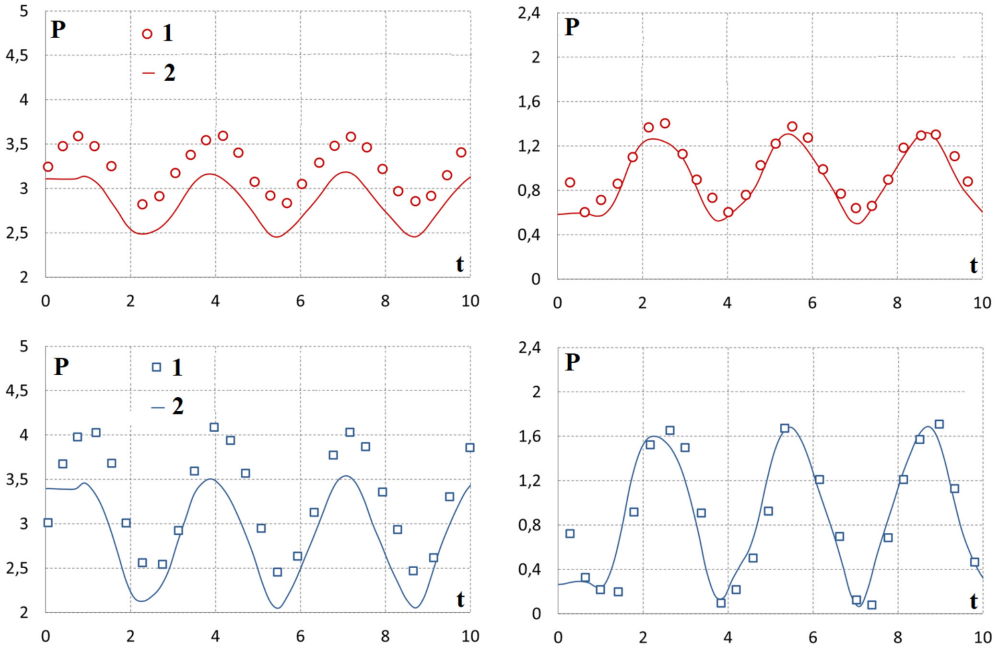


Рис. 4. График зависимости избыточного давления P (кПа) от времени T (сек) при $\varphi_0 = 4°$ и $\varphi_0 = 8°$: 1 — эксперимент; 2 — расчёт

максимальное отклонение амплитуды наблюдается на датчике *1* и составляет около 20%. Отклонения усреднялись на трёх соседних экстремумах графиков давления.

Высокая погрешность в определении значения давления на сенсорах обусловлена наличием эффекта плескания жидкости, которое вызывает резкие изменения градиентов давления, приводит к деформации границы раздела фаз и образованию капель. Также для установления стационарного режима плескания необходимо значительное время, а с течением времени погрешность может постепенно накапливаться. Это связано с накоплением ошибок в численных методах, особенно при длительных расчётах, где малые отклонения в начальных этапах могут усиливаться из-за нелинейности уравнений. Это вносит существенную неоднородность в распределение давления на сенсорах в резервуаре. Так для сенсора № 3 максимальная погрешность составляет до 25 %, в то время как для сенсора № 2 — до 10 %.

2.3. Плескание жидкости в качающейся ёмкости с перегородками

Постановка задачи 2.3. Постановка третьей задачи аналогична предыдущей [26], за тем исключением, что внутри ёмкости находятся перегородки, положение и геометрические размеры которых представлены на рис. 5.

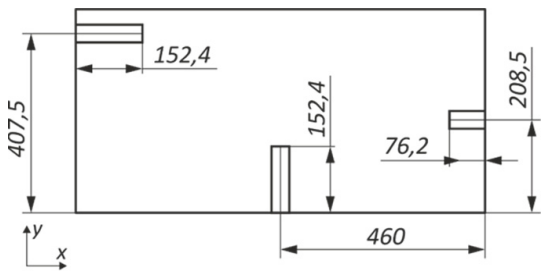


Рис. 5. Схема резервуара и положение перегородок (размеры указаны в мм)

Валидация расчётов, выполненных в пакете программ «Логос», также проводилась на

данных [26]. Результаты сравнения по величине избыточного давления в точках расположения датчиков при степени заполнения 75% и угловой частоте колебаний 2 рад/с представлены на рис. 6.

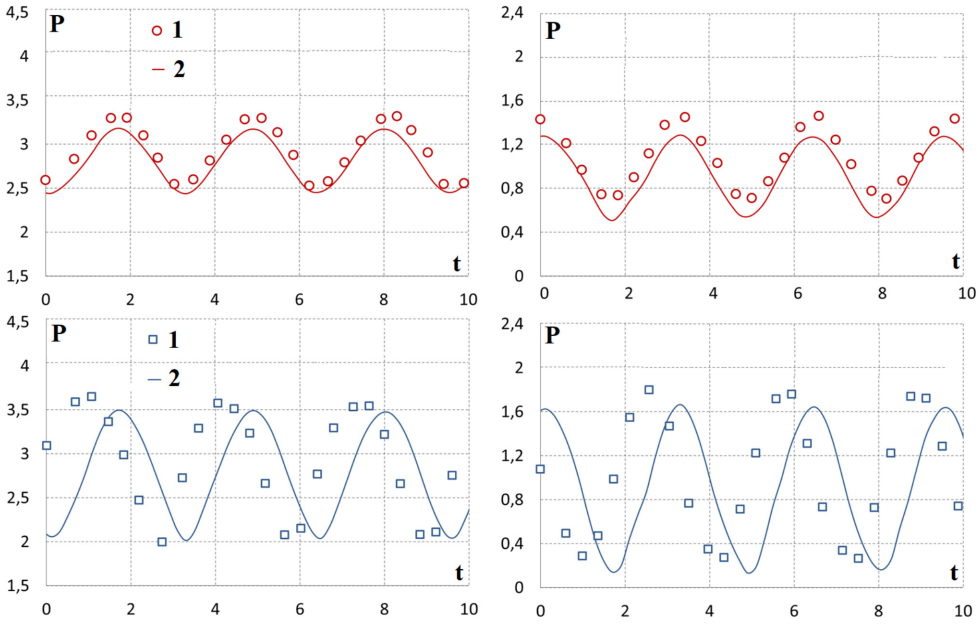


Рис. 6. График зависимости избыточного давления P (кПа) от времени T (сек) при $\varphi_0 = 4°$ и $\varphi_0 = 8°$: 1 — эксперимент; 2 — расчёт

Результаты валидации 2.3. Для всех рассматриваемых случаев плескания воды в качающейся ёмкости, как с наличием перегородок, так и без них, наблюдается корректное воспроизведение амплитуды и частоты колебаний давления жидкости. Относительное отклонение амплитуды колебаний давления для постановки с перегородками не превосходит 20%. При колебаниях резервуара с перегородками с угловой амплитудой $\varphi_0 = 8°$ наблюдается сдвиг колебаний давления при расчётах по фазе до 80° относительно экспериментальных данных. Для данной задачи получено довольно высокое значение относительной погрешности в расчёте давления на сенсорах. Причины таких высоких отклонений от эталонных данных описаны в задаче выше. Дополнительный вклад в увеличение погрешности оказывает наличие перегородок, вносящих дополнительные нелинейные эффекты в распределение давления и течения жидкости. Перегородки создают локальные зоны турбулентности, изменяя гидродинамические характеристики потока и усиливая динамику деформации границы раздела фаз.

2.4. Изотермическое заполнение двух сообщающихся баков

Постановка задачи 2.4. В качестве четвёртой задачи рассматривается изотермическое заполнение двух цилиндрических баков, соединённых между собой через трубовидный канал. В начальный момент времени весь внутренний объём заполнен газом, а через входное отверстие одного из баков с фиксированной скоростью $U = 0.5$ м/с поступает вода. Высота баков составляет 1 м, диаметр 0.6 м, длина и диаметр соединительного канала соответственно 0.7 м и 0.08 м, длина и диаметр входного канала соответственно 0.1 м и 0.08 м. На стенках баков и каналов задаётся граничное условие «Стенка без проскальзывания», входной канал — «Скорость на входе» с соответствующим значением скорости. В задаче оценивается величина массового дисбаланса газа на протяжении всего времени расчёта. Расчёт проводился с числом Куранта $C = 1$ до момента времени $t_{\max} = 220$ с, в который газ сжимается в 30 раз.

Результаты валидации 2.4. На рис. 7 показана изоповерхность объёмной доли воды на различные моменты времени. На начальном этапе вода втекает в левый бак, и её уровень начинает постепенно подниматься. Заполнив бак наполовину, вода через соединительный канал перетекает во второй бак, где постепенно начинается его заполнение. К моменту времени, равному 167 с, газ из соединительного канала полностью вытесняется и концентрируется у верхних областей обоих баков.

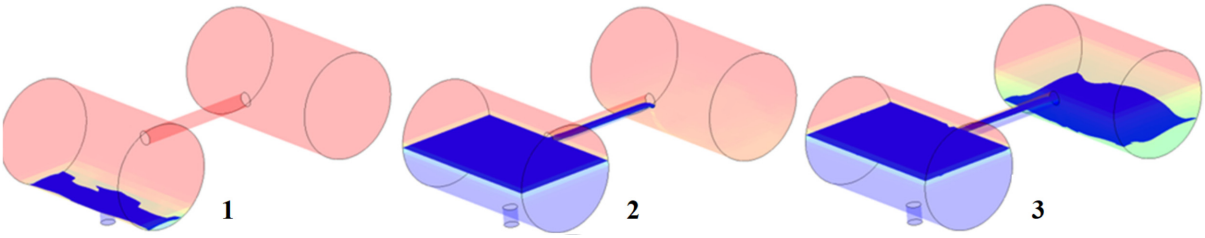


Рис. 7. Изоповерхность объемной доли воды по уровню $\alpha = 0.5$
на различные моменты времени: 1 — $t = 3$ сек; 2 — $t = 60$ сек; 3 — $t = 100$ сек

По результатам расчётов был получен график массового дисбаланса, представленный на рис. 8. Максимальное значение процентного отклонения массы газа по времени составило 0,155%.

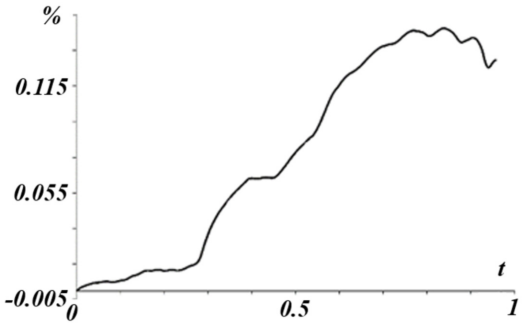


Рис. 8. Процентное отклонение массы газа по времени

Высокая точность определения дисбаланса массы подтверждает, что используемая методика, основанная на методе VOF, обладает консервативностью, то есть корректно сохраняет массу фаз на всех этапах расчёта. Это обеспечивается за счёт строгого соблюдения законов сохранения массы, импульса и энергии, что характерно для численных схем, адаптированных для двухфазных течений. Низкий процент дисбаланса свидетельствует о том, что модель не только учитывает физические взаимодействия, но и минимизирует численные ошибки.

2.5. Изотермическое заполнение бака жидкостью

Постановка задачи 2.5. Рассматривается изотермический процесс заполнения цилиндрического бака жидкостью, сопровождаемый сжатием находящегося в нём газа. В задаче контролируется масса газа, а также давление, которые сравниваются с аналитическим решением.

По трубовидному каналу длиной 0.7 м и диаметром 0.08 м со скоростью $U = 0.5$ м/с равномерно поступает вода, которая втекает в бак цилиндрической формы диаметра 0.6 м и высотой 1 м. На остальные границы расчётной области наложено граничное условие «Стенка». В начальный момент времени бак полностью заполнен газом, который на протяжении всего процесса не покидает расчётную область.

Аналитическая зависимость давления от времени может быть получена из уравнения Менделеева — Клайперона при постоянной массе газа: $p(t) = \frac{\rho_0 V_0}{V_0 - Qt} RT$, где ρ_0 и V_0 — соответственно плотность газа и объём в начальный момент времени, R — газовая постоянная, T — температура; Q — объёмный расход жидкости, втекающей в бак.

Результаты валидации 2.5. На рис. 9 приведено сравнение аналитического и полученного в результате расчёта в «Логос» графиков изменения давления в зависимости от времени. Используются следующие безразмерные величины: $P^* = \dfrac{P(t)}{P_0}$, $t^* = t \cdot U \cdot S/V_0$, где P_0 – начальное давление в баке, S – площадь входа в бак.

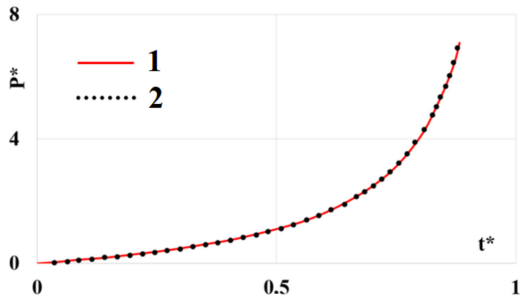


Рис. 9. Графики давления в баке:
1 — расчёт «Логос»; 2 — аналитические данные

Из графика видно, полученные в расчёте, хорошо согласуются с аналитическими данными, среднее отклонение от точного решения составляет менее 0.5%.

3. ЗАДАЧИ ДИНАМИКИ ГРАНИЦЫ РАЗДЕЛА ФАЗ

Задачи данного типа встречаются при рассмотрении двухфазных сред в баках космических и летательных аппаратов [26] в условиях существенной неоднородности температур, которая может быть вызвана как внешними тепловыми потоками, так и локальными течениями жидкостей и газов.

3.1. Задача Стефана

Постановка задачи 3.1. В первой задаче данного типа, задаче Стефана, рассматривается движение плоской межфазной границы между паром и жидкостью, определяемое испарением жидкости из-за взаимодействия с перегретым паром. Задача имеет классическое решение для величины скорости движения межфазной границы [27]. Изначально имеются неподвижные жидкость и паровая прослойка, находящиеся в равновесии. Их температура в начальный момент времени равна температуре насыщения T_{sat}, далее температура пара увеличивается за счёт поступления тепла от нагреваемой стенки, находящейся при температуре T_w большей температуры насыщения. Пар по мере испарения вытесняет жидкость, что приводит к движению межфазной границы по направлению от нагреваемой стенки.

Для численного решения выбрана область длиной $L = 0.1$ м, где построена одномерная расчётная сетка с размером ячеек $\Delta x = 10^{-3} \cdot L$, внешний вид которой представлен на рис. 10. Левая граница — непроницаемая стенка с температурой T_w, при этом $(T_w - T_{\text{sat}} = 25K)$; правая граница — граница с фиксированным давлением.

В соответствии с [27], аналитическая зависимость положения межфазной границы от времени x_{in} и распределение температуры могут быть найдены из следующих соотношений: $x_{\text{in}}(t) = 2\zeta\sqrt{a_v t}$, где $x_{\text{in}}(t)$ — положение межфазной границы.

$$T(x,t) = T_w - \frac{T_w - T_{\text{sat}}}{\operatorname{erf}(\zeta)} \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{a_v t}}\right),$$

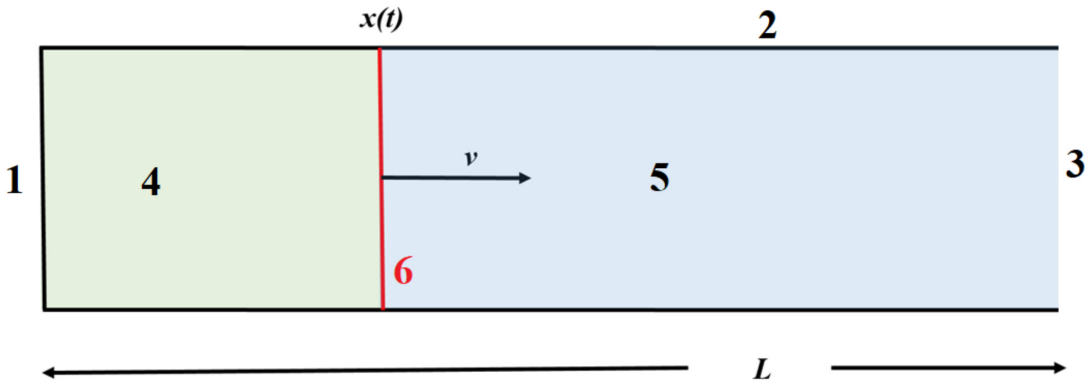


Рис. 10. Схема численного эксперимента:
1 — непроницаемая граница с температурой $T_w > T_{\text{sat}}$; 2 — непроницаемая адиабатическая граница; 3 — открытая граница; 4 — пар; 5 — жидкость; 6 — межфазная граница

где $T(x,t)$ — распределение температуры, T_w — температура стенки, T_{sat} — температура насыщения, $a_v = \dfrac{\lambda_v}{\rho_v c_v}$ — коэффициент температуропроводности пара, ρ_v — плотность пара, c_v — теплоёмкость пара, λ_v — теплопроводность пара.

Константа ζ вычисляется из решения следующего уравнения:

$$\zeta \exp(\zeta^2)\text{erf}(\zeta) = \frac{c_v(T_w - T_{\text{sat}})}{\sqrt{\pi} h_{vl}},$$

где $\text{erf}(x)$ — функция ошибки.

Результаты валидации 3.1. В начальный момент времени пар занимает две ячейки, примыкающие к нагреваемой стенке. Численное моделирование проводилось для давления насыщения воды равное 101.3 кПа и для нескольких , для которого в [27] приводится аналитическое решение. На рис. 11 представлены графики зависимости положения межфазной границы от времени для расчётов по моделям кипения Tanasawa и Lee в сравнении с аналитикой для всех расчётных случаев. Модель Tanasawa точнее описывает аналитику. Модель Lee также даёт приемлемые результаты, особенно для случаев с $p_{\text{sat}} = 571$ кПа и $p_{\text{sat}} = 14044$ кПа. Для этих случаев результаты по моделям Tanasawa и Lee практически совпадают.

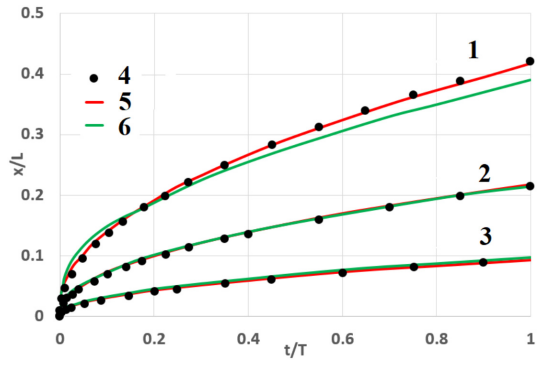


Рис. 11. Положение межфазной границы от времени для различных давлений:
1 — $P = 101,3$ кПа, 2 — $P = 571$ кПа, 3 — $P = 14.044$ МПа;
4 — аналитические данные; 5 — расчёт по модели Танасава; 6 — расчёт по модели Лии

В задачах моделирования двухфазных течений, численная диффузия может приводить к размыванию границы раздела фаз, что снижает точность расчётов и увеличивает погреш-

ность. Для минимизации данного эффекта использовалась сжимающая схема HRIC [28], которая обеспечивает сохранение резких градиентов давления и плотности за счёт локальной адаптации численной схемы. Использование схемы HRIC позволило повысить стабильность и точность моделирования. Средняя погрешность расчётов для модели Lee составляет до 6%, для модели Tanasawa — до 3%, при этом чем выше давление, тем меньше погрешность расчётов.

3.2. Конденсация одиночного пузырька насыщенного пара

Постановка задачи 3.2. Во второй задаче моделируется конденсация одиночного пузырька насыщенного пара в неподвижной недогретой воде [29]. На начальный момент времени пузырёк пара диаметром $D = 1$ мм окружён водой, находящейся при температуре ниже температуры насыщения на 25 K. Фазовый обмен, происходящий на межфазной границе, приводит к уменьшению размера пузырька за счёт конденсации. Результаты численного моделирования сравниваются с опубликованными экспериментальными данными [30]. Геометрия данной задачи представлена на рис. 12.

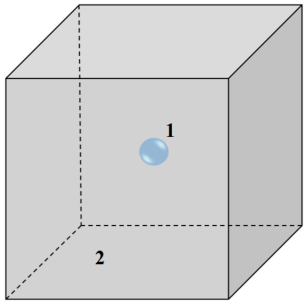


Рис. 12. Схема задачи:
1 — пузырёк пара с температурой $T_{\text{vapor}} = T_{\text{sat}}$; 2 — вода с температурой $T_{\text{water}} = (T_{\text{sat}} - 25)$

На фронтальной и задней поверхности области моделирования задаётся граничное условие симметрии. Сверху задано фиксированное давление, на всех остальных граничных поверхностях задано граничное условие «Стенка с прилипанием». Температура пара на начальный момент времени равна температуре насыщения $T_{\text{sat}} = 380{,}26$ K при давлении 130 кПа, температура воды на начальный момент времени равна $T = T_{\text{sat}} - 25$ K.

Результаты валидации 3.2. В ПП «Логос» реализовано три модели кипения, в каждой из которых для калибровки модели присутствуют эмпирические коэффициенты. Для корректного моделирования изменения формы и диаметра пузырька были проведены калибровочные расчёты, позволившие определить оптимальные значения эмпирических коэффициентов. На рис. 13 представлены результаты расчётов по трём моделям фазовых переходов, реализованным в «Логос», с оптимальными значениями эмпирических параметров. Из графиков следует, что все три модели позволяют получить данные об изменении диаметра пузырька во времени.

Среди доступных моделей кипения, модель Tanasawa меньше всего отклоняется от экспериментальных данных. На рис. 14 представлена динамика изменения формы пузырька со временем: сравнение численных расчётов по модели Tanasawa с экспериментом. Видно хорошее согласие экспериментальных данных с расчётными.

Полученные данные показали, что все реализованные в «Логос» модели межфазного массообмена позволяют решать задачи о конденсации газа.

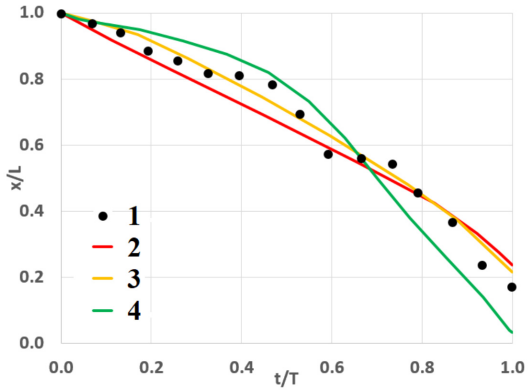


Рис. 13. Динамика изменения диаметра пузырька во времени:
1 — экспериментальные данные; 2 — расчёт по модели Лии;
3 — расчёт по модели Танасава; 4 — расчёт по модели Рохсёнова

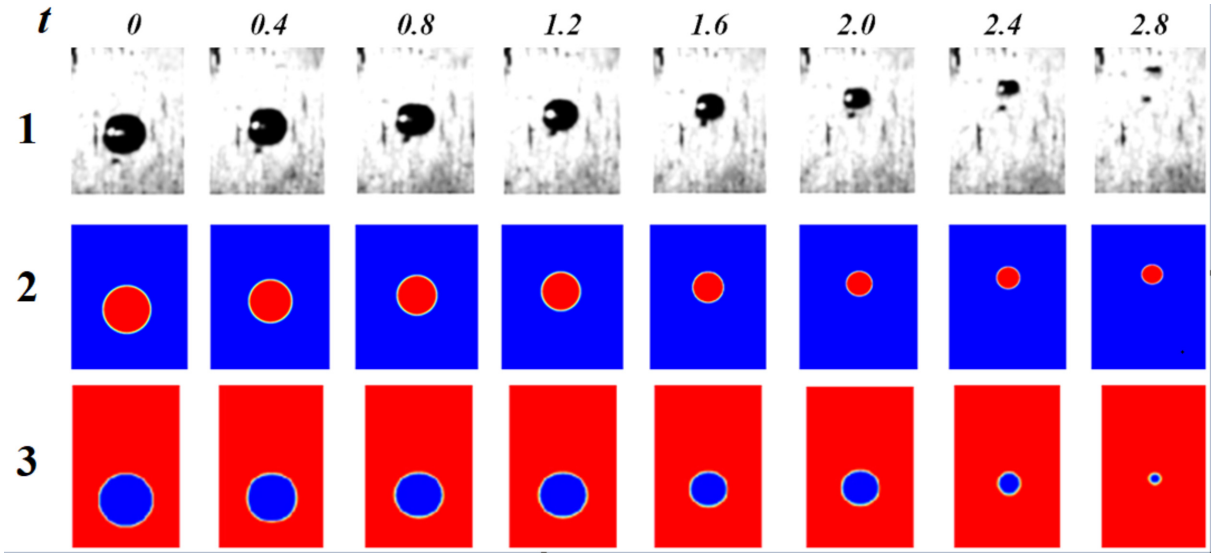


Рис. 14. Изменение формы и размера пузырька:
1 — экспериментальные фотографии (см.[31]); 2 — расчёт «Логос»;
3 — расчёт OpenFOAM (см. [32])

3.3. Сжатие двухфазной среды

Постановка задачи 3.3. В задаче рассматривается процесс сжатия двухфазной среды «жидкость-газ» при наличии свободной поверхности: закрытая область, изначально заполненная до некоторого уровня жидкостью, сжимается посредством поршня. В качестве эталонных данных используются аналитические значения средней температуры и давления в расчётной области. На рис. 15 приведена постановка задачи.

По периметру расчётной области задаются границы «Стенка без проскальзывания», при этом для учёта движения поршня для соответствующей стенки следует использовать тип подвижной границы «Подвижная». В задаче рассматривается адиабатический процесс сжатия термодинамической системы «несжимаемая жидкость-идеальный газ»: закрытая теплоизолированная область размером $L \times L \times 0{,}2 \cdot L$ ($L = 1$ м), изначально заполненная водой и воздухом в соотношении объёмов 1:1 при $P_0 = 105$ Па и $T_0 = 300$ K, сжимается до половины своего начального объёма. Данный процесс имеет известное аналитическое решение (уравнение

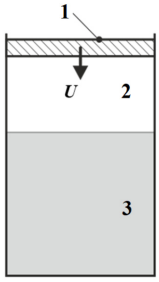


Рис. 15. Схема задачи:
1 — поршень движется со скоростью $U = 0.5$ м/с; 2 — газ; 3 — жидкость

Пуассона):

$$P(t) = P_0\left(\frac{V_0}{V(t)}\right)^{\gamma}, \quad T(t) = T_0\left(\frac{V_0}{V(t)}\right)^{(\gamma-1)},$$

где $\gamma = 1{,}4$ — показатель адиабаты, P_0 — начальное давление, V_0 — начальный объём, T_0 — начальная температура.

Сжатие области происходит за счёт движения одной из стенок со скоростью $U = 0{,}5$ м/с, что обеспечивает следующий закон изменения объёма: $V(t) = \left(1 - \dfrac{U \cdot t}{L}\right)V_0$. С учётом этого зависимости давления и температуры от времени приобретают вид:

$$P(t) = \frac{P_0}{2}\left(1 - \frac{U \cdot t}{L}\right)^{-\gamma}, \quad T(t) = \frac{T_0}{2}\left(1 - \frac{U \cdot t}{L}\right)^{1-\gamma}.$$

Данные зависимости сравниваются с осреднёнными по пространству расчётными значениями давления и температуры.

Результаты валидации 3.3. По результатам расчётов получены значения среднего давления и средней температуры в зависимости от времени. На рис. 16 приведены сравнения расчётных данных, полученных в пакете программ «Логос», с аналитическим решением.

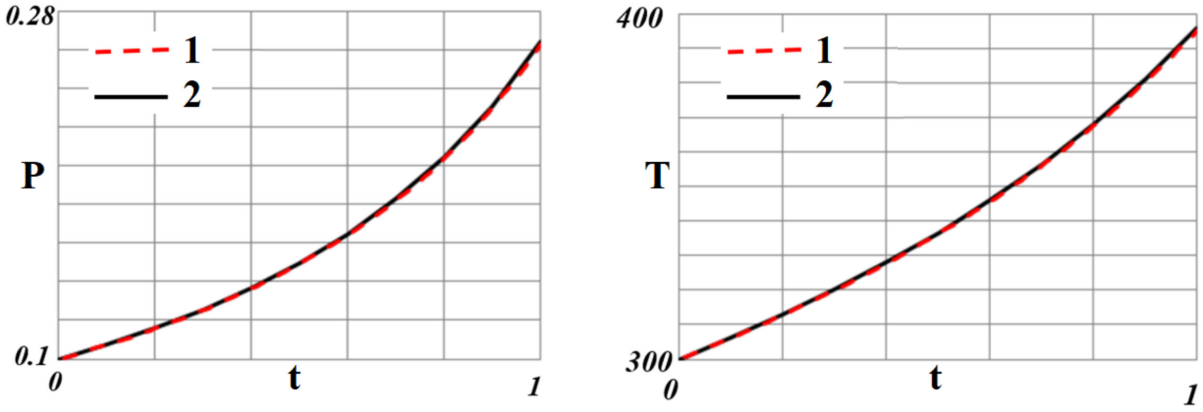


Рис. 16. Графики зависимости давления P (МПа) и температуры (К) от времени t (сек):
1 — расчёт «Логос»; 2 — аналитические данные

Полученные результаты показывают хорошее согласование между численным моделированием и аналитическим решением: среднее значение относительной погрешности давления и температуры не превышает 2%, что свидетельствует о высокой точности метода.

3.4. Распространения малых возмущений в смеси

Постановка задачи 3.4. Исследуется процесс распространения малых возмущений в жидкости с ненулевым газосодержанием. Это типичный пример задачи по оценке опасности возникновения кавитационных процессов. В качестве эталонных данных используется расчётная скорость распространения малых возмущений [33]. Рассматривается одномерный канал длиной $l = 1$ м. В расчёте измеряется скорость звука, которая сравнивается с аналитическим решением. На левой и правой границах задано граничное условие фиксированного статического давления. На остальных границах задано условия непротекания. Канал полностью заполнен однородной смесью, состоящей на 99% из воды и на 1% из воздуха. Давление в начальный момент времени составляет $p_0 = 1$ атм. На правом конце задано давление p_0, на левом — $1{,}01 \cdot p_0$.

В начальный момент времени на левой границе области образуется волна сжатия, которая движется в сторону меньшего давления со скоростью звука c_{sound}. Скорость звука для данной смеси можно оценить аналитически с использованием обобщения формулы Мэллока [33]:

$$c_{\text{sound}} = \sqrt{\frac{kp}{\rho a_{\text{gas}}}} = 101{,}27 \text{ м/с}$$

где $k = 1{,}4$ — коэффициент политропы, p — давление, ρ — плотность смеси, a_{gas} — объёмная доля газа в смеси.

Результаты валидации 3.4. Результаты расчётов в пакете программ «Логос» изменения параметров в канале для момента времени $t = 0{,}0049$ с представлены на рис. 17.

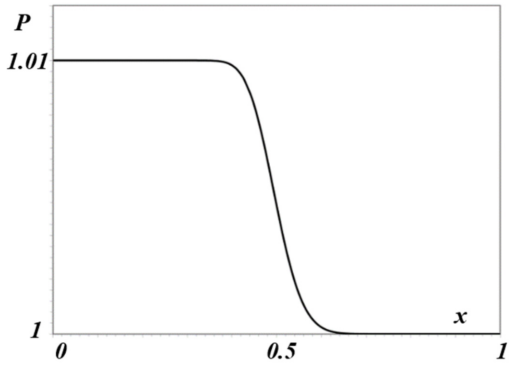


Рис. 17. График изменения давления

Здесь используются безразмерные величины $p^* = p/p_0$ и $x^* = x/l$, где x — координата по оси, отложенной от начала канала и вдоль его длины. По результатам проведённых расчётов скорость распространения малых возмущений составила 101,41 м/с, что отличается от аналитического значения на 0,14%.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлены результаты валидации пакета программ «Логос» на задачах динамики и теплообмена в двухфазных средах со свободной поверхностью. Гидродинамика двухфазного потока рассчитывается на основе решения системы уравнений Навье-Стокса, дополненной уравнениями переноса объёмных долей жидкости и газа в рамках односкоростной многофазной модели жидкости VOF. Система уравнений решается методом SIMPLE, реализованном на базе конечно-объёмной дискретизации для неструктурированных расчётных сеток. Базис валидационных задач разбит на два класса задач: задачи динамики границы раздела фаз и задачи сопряжённого тепломассообмена в двухфазных средах. Базис содержит девять

задач, для которых доступны эталонные аналитические или экспериментальные данные по ключевым физическим параметрам задачи: колебания воды в резервуаре под действием силы тяжести, плескание жидкости в качающейся ёмкости, плескание жидкости в качающейся ёмкости с перегородками, изотермическое заполнение двух сообщающихся баков, изотермическое заполнение бака жидкостью, задача Стефана, конденсация одиночного пузырька насыщенного пара, сжатие двухфазной среды, распространения малых возмущений в смеси. В результате решения валидационного базиса задач получены следующие значения относительной погрешности: для задач исследования динамики границы раздела фаз усреднённая относительная погрешность лежит в диапазоне от 0,7% (амплитуда уровня воды в задаче о колебании воды в резервуаре под действием силы тяжести), до 25% (амплитуда уровня воды в задаче о плескании жидкости в качающейся ёмкости); для задач сопряжённого тепломассообмена в двухфазных средах погрешность в диапазоне от 0,14% (скорость распространения возмущений в задаче о распространении малых возмущений в смеси), до 6% (положение границы раздела фаз в задаче о движении межфазной границы за счёт испарения).

Исследования показали, что пакет программ «Логос» позволяет корректно воспроизводить основные физические явления и процессы, характерные для течений двухфазных сред в присутствии границы раздела с допустимой для данного класса задач погрешностью.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Результаты получены при финансовой поддержке национального проекта «Наука и университеты» в рамках программы Минобрнауки РФ по созданию молодёжных лабораторий (проект FSWE-2024-0001). 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. *Wu M., Zhang J., Gui N.* Advances in the modeling of multiphase flows and their application in nuclear engineering // A Review. Exp. Comput. Multiph. Flow. 2024. N 6. P. 287–352; DOI: 10.1007/s42757-024-0202-5
2. *Апостол Ю.С., Вожаков И.С.* Численное моделирование турбулентного газового потока над волнистой поверхностью // Сиб. журн. индустр. матем. 2023. V. 26, № 2. С. 5–13.
3. *Mani M., Dorgan J.* A Perspective on the State of Aerospace Computational Fluid Dynamics Technology // Annual Rev. Fluid Mech. 2023. V. 55. P. 431–457; DOI: 10.1146/annurev-fluid-120720-124800
4. *Козелков А.С., Лашкин С.В., Куркин А.А., Корнев А.В., Вялых А.М.* Параллельная реализация метода SIPMLE на основе многосеточного метода // Сиб. журн. вычисл. математики. 2020, Т. 23, № 1. С. 1–22.
5. *Козелков А.С., Таранов А.Е., Курулин В.В., Рудниченко А.А., Плыгунова К.С., Крутякова О.Л.* Валидация программного комплекса Логос с использованием задач в судостроении // Труды Крыловского государственного научного центра. 2023. Т.4, № 406. С. 59–73.
6. *Kozelkov A., Kurkin A., Kurulin V., Plygunova K., Krutyakova O.* Validation of the LOGOS software package methods for the numerical simulation of cavitational flows // Fluids. 2023. V. 8, Iss. 3. P. 104; DOI: 10.3390/fluids8030104
7. *Hu G., Celik I.* Eulerian Lagrangian based large eddy simulation of a partially aerated bubble column // Chemical Engrg. Sci. 2008. V. 63. P. 253–271.
8. *Linmin Li, Yabiao Niu, Guolai Wei, Sivakumar Manickam, Xun Sun, Zuchao Zhu* Investigation of cavitation noise using Eulerian-Lagrangian multiscale modeling // Ultrasonics Sonochemistry. 2023. V. 97. Article number 106446.

9. *Alkhezzi A., Fan Y.* Improved two-fluid model for segregated flow and integrated multiphase flow modeling for downhole pressure predictions // Energies. 2023. V. 16, Iss. 24; DOI: 10.3390/en16247923
10. *Zurner Till, Kamble Vikrant, Rzehak Roland, Eckert Kerstin* Experimental and numerical investigation of turbulent multiphase jets // Minerals Engrg. 2024. V. 211.
11. *Mohan A., Tomar G.* Volume of Fluid Method: A Brief Review // J. Indian Inst. Sci. 2024. V. 104. P. 229–248; DOI: 10.1007/s41745-024-00424
12. *Городнов А.О., Лаптевv И.В.* Влияние теплоемкости стенки на рост давления и температурную стратификацию при термической конвекции паров водорода в вертикальном цилиндрическом резервуаре // Труды МАИ. 2021. № 116. С. 2.
13. *Тятюшкина Е.С., Козелков А.С., Куркин А.А., Курулин В.В., Ефремов В.Р., Уткин Д.А.* Оценка численной диффузии метода конечных объемов при моделировании поверхностных волн // Вычислительные технологии. 2019. Т.24. № 1. С. 106–119, DOI: 10.25743/ICT.2019.24.1.008.
14. *Liu H., Tang J., Sun L.* An assessment and analysis of phase change models for the simulation of vapor bubble condensation // Internat. J. Heat Mass Transfer. 2020. V. 157; DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.119924
15. *Seric I., Afkhami S., Kondic L.* Direct numerical simulation of variable surface tension flows using a Volume-of-Fluid method // J. Comput. Phys. 2018. V. 352, N 1. P. 615–636.
16. *Menter F.R., Kuntz M., Langtry R.* Ten years of industrial experience with the sst turbulence model // Turbulence, Heat and Mass Transfer. 2003, V. 4. P. 625–632.
17. *Ferziger J., Peric M.* Computational Method for Fluid Dynamics. N. Y.: Springer-Verl., 2002.
18. *Singh S., Kashyap P.* Finite volume method: an efficient tool for transport equation solutions // J. Propulsion Technology. 2023. V. 44, N 6; DOI: 10.52783/tjjpt.v44.i6.3938
19. *Kovenya V.M., Babintsev P.V.* Application of splitting algorithms in the method of finite volumes for numerical solution of the Navier–Stokes equations // J. Appl. Indust. Math. 2018. V. 12. P. 479–491; DOI: 10.1134/S1990478918030080
20. *Efimov D., Polyakov A., Aleksandrov A.* Discretization of homogeneous systems using Eulermethod with a state-dependent step // Automatica. 2019. V. 109. Article number 108546.
21. *Fletcher K.* Computational Methods in Fluid Dynamics in Two Volumes. M: Mir, 1991.
22. *Waclawczyk T., Koronowicz T.* Comparison of cicsam and hric high-resolution schemes for interface capturing // J. Theor. Appl. Mech. 2008. V. 46, N 2. P. 325–345.
23. *Kim G., Rhee H., Jeon W.* Lateral sloshing analysis by cfd and experiment for a spherical tank // Internat. J. Aeronaut. Space Sci. 2020. V. 21. P. 816–825; DOI: 10.1007/s42405-020-00295-2
24. *Ubbink O.* Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces // Department of Mechanical Engrg. Imperial College of Science: Technology & Medicine. 1997.
25. *Akyildiz H., Unal N.* Sloshing in a three-dimensional rectangular tank numerical simulation and experimental validation // Ocean Engrg. 2010. V. 33, N 16. P.2135–2149.
26. *Zhang J., Wang Y. Liu.* Numerical simulation of two-phase fluid dynamics in a spacecraft propellant tank under low-gravity conditions // Acta Astronautica. 2021. N 187. P. 45–58.
27. *Welch S. and Wilson J.* A volume of fluid based method for fluid flows with phase change // J. Comp. Phys. 2000. V. 160. P. 662–682.
28. *Пузан А. Ю., Козелков А. С.* Численная оценка погрешности моделирования испарения с использованием односкоростной многофазной модели жидкости со свободной поверхностью методом конечных объёмов // Вопросы атомной науки и техники. 2026. С. 53–67.
29. *Kozelkov A. S., Puzan A. Y.* Estimation of the numerical diffusion of the finite volume method in condensation modeling using a single-rate multiphase model of a liquid with a free surface // Engrg. Phys. 2024. N 11. P. 41–55, DOI: 10.25791/infizik.11.2024.1439.
30. *Kamei S.,Hirata M.* Study on condensation of a single vapor bubble into subcooled water-Part 2, experimental analysis // Heat Trans. Jpn. Res., 1990.
31. *Samkhaniani N., Ansar M.* Numerical simulation of bubble condensation using CF-VOF // Progress in Nuclear Energy. 2016. V. 89. P. 120–131.

32. *Zeng Q., Cai J., Yin H.* Numerical simulation of single bubble condensation in subcooled flow using OpenFOAM // Progress Nucl. Energy. 2015. V. 83. P. 336–346.

33. *Elperin T., Fominykh A.* Heat transfer during gas hydrate formation in gas-liquid slug flow // Heat and Mass Transfer. 1996. V. 31, P. 179–183; DOI: 10.1007/BF02333317

SIBERIAN JOURNAL OF INDUSTRIAL MATHEMATICS

UDC 532.5:519.6

VALIDATION OF THE LOGOS SOFTWARE PACKAGE ON THE PROBLEMS OF DYNAMICS AND HEAT EXCHANGE IN TWO-PHASE MEDIA USING A SINGLE-SPEED MULTIPHASE MODEL OF A LIQUID WITH A FREE SURFACE

© 2026 **A. S. Kozelkov**[1,4a], **An. Yu. Puzan**[1,3b], **I. V. Laptiev**[2c], **V. V. Kurulin**[1,4], **A. A. Kuroedov**[2], **A. O. Gorodnov**[2]

[1]*FSUE «RFNC-VNIIEF», Sarov 607188, Russia*
[2]*Keldysh Research Center, Moscow 125438, Russia*
[3]*Sarov Branch of Lomonosov Moscow State University, Sarov 607328, Russia*
[4]*Nizhny Novgorod State Technical University n. a. R. E. Alekseev, Nizhny Novgorod 603155, Russia*

E-mails: [a]askozelkov@mail.ru, [b]pppan@yandex.ru, [c]laptev.iv.kerc@gmail.com

Received 14.01.2026, revised 26.05.2026, accepted 15.07.2026

Abstract. The article presents the results of validation of the Russian Logos software package on the problems of dynamics and heat exchange in two-phase environments. Two-phase flow is modeled on the basis of the solution of the Navier-Stokes equation system, the interphase boundary is taken into account by means of a single-speed multiphase VOF fluid model. The system of equations is solved by the Simple method, implemented on the basis of finite-volume sampling for unstructured design grids. The basis of validation problems is divided into two classes: phase boundary dynamics problems and conjugate heat and mass exchange problems in two-phase media. The basis contains nine problems for which reference analytical or experimental data on key physical parameters of the problem are available. The purpose of the Logos validation was to confirm its ability to adequately describe the dynamics and heat transfer in two-phase environments, as well as to ensure high accuracy of the simulation results. As part of the study, the following averaged values ? ? of relative error were obtained for various classes of tasks: for tasks of studying the dynamics of the phase boundary, the averaged relative error lies in the range from 0.7(the amplitude of the water level in the problem of water fluctuation in the tank under the influence of gravity), up to 25(the amplitude of the water level in the problem of splashing liquid in a swinging tank); for problems of conjugate heat and mass exchange in two-phase media, an error in the range from 0.14(the rate of propagation of perturbations in the problem of propagation of small perturbations in the mixture), up to 6(the position of the phase boundary in the problem of the movement of the interphase boundary due to evaporation). Studies have shown that the Logos software package makes it possible to correctly reproduce the main physical phenomena and processes characteristic of currents of two-phase media in the presence of an interface with an error permissible for this class of tasks.

Keywords: hydrodynamics, Navier–Stokes equations, multiphase, VOF, free surface, mass exchange, heat exchange.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.306

REFERENCES

1. Wu M., Zhang J., Gui N. Advances in the modeling of multiphase flows and their application in nuclear

English translation is published in Journal of Applied and Industrial Mathematics, 2026, Vol. 20, No. 3.

engineering. *A Review. Exp. Comput. Multiph. Flow*, 2024, No. 6, pp. 287–352; DOI: 10.1007/s42757-024-0202-5

2. Apostol Yu.S., Vozhakov I.S. Numerical modeling of turbulent gas flow over a wavy surface. *J. Appl. Indust. Math.*, 2023, Vol. 17, No. 2, pp. 235–241.
3. Mani M., Dorgan J. A Perspective on the State of Aerospace Computational Fluid Dynamics Technology. *Annual Rev. Fluid Mech.*, 2023, Vol. 55, pp. 431–457; DOI: 10.1146/annurev-fluid-120720-124800
4. Kozelkov A.S., Lashkin S.V., Kurkin A.A., Kornev A.V., Vyalyh A.M. Parallel'naya realizaciya metoda SIPMLE na osnove mnogosetochnogo metoda [Parallel implementation of the SIPMLE method based on the multigrid method]. *Sib. Zhurn. Vychisl. Mat.* [Sib. J. Comput. Math.], 2020, Vol. 23, No. 1, pp. 1–22 (in Russian).
5. Kozelkov A.S., Taranov A.E., Kurulin V.V., Rudnichenko A.A., Plygunova K.S., Krutyakova O.L. Validaciya programmnogo kompleksa Logos s ispol'zovaniem zadach v sudostroenii [Validation of Logos software package using tasks in shipbuilding]. *Trudy Krylovskogo gosudarstvennogo nauchnogo centra* [Transactions of the Krylov State Research Centre], 2023, Vol. 4, No. 406, pp. 59–73 (in Russian).
6. Kozelkov A., Kurkin A., Kurulin V., Plygunova K., Krutyakova O. Validation of the LOGOS software package methods for the numerical simulation of cavitational flows. *Fluids*, 2023, Vol. 8, Iss. 3, pp. 104; DOI: 10.3390/fluids8030104
7. Hu G., Celik I. Eulerian Lagrangian based large eddy simulation of a partially aerated bubble column. *Chemical Engrg. Sci.*, 2008, Vol. 63, pp. 253–271.
8. Linmin Li, Yabiao Niu, Guolai Wei, Sivakumar Manickam, Xun Sun, Zuchao Zhu Investigation of cavitation noise using Eulerian-Lagrangian multiscale modeling. *Ultrasonics Sonochemistry*, 2023, Vol. 97. Article number 106446.
9. Alkhezzi A., Fan Y. Improved two-fluid model for segregated flow and integrated multiphase flow modeling for downhole pressure predictions. *Energies*, 2023, Vol. 16, Iss. 24; DOI: 10.3390/en16247923
10. Zurner Till, Kamble Vikrant, Rzehak Roland, Eckert Kerstin Experimental and numerical investigation of turbulent multiphase jets. *Minerals Engrg.*, 2024, Vol. 211.
11. Mohan A., Tomar G. Volume of Fluid Method: A Brief Review. *J. Indian Inst. Sci.*, 2024, Vol. 104, pp. 229–248; DOI: 10.1007/s41745-024-00424
12. Gorodnov A.O., Laptev I.V. Vliyanie teploemkosti stenki na rost davleniya i temperaturnuyu stratifikaciyu pri termicheskoj konvekcii parov vodoroda v vertikal'nom cilindricheskom rezervuare [Influence of wall heat capacity on pressure growth and temperature stratification during thermal convection of hydrogen vapors in a vertical cylindrical tank]. *Trudy MAI* [Proceed. MAI], 2021, No. 116, pp. 2 (in Russian).
13. Tyatyushkina E.S., Kozelkov A.S., Kurkin A.A., Kurulin V.V., Efremov V.R., Utkin D.A. Ocenka chislennoj diffuzii metoda konechnyh ob'emov pri modelirovanii poverhnostnyh voln [Evaluation of numerical diffusion of the finite volume method when modelling surface waves]. *Vychisl. Tehnol.* [Comput. Technol.], 2019, Vol. 24, No. 1, pp. 106–119 (in Russian); DOI: 0.25743/ICT.2019.24.1.008
14. Liu H., Tang J., Sun L. An assessment and analysis of phase change models for the simulation of vapor bubble condensation. *Internat. J. Heat Mass Transfer*, 2020, Vol. 157; DOI: 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.119924
15. Seric I., Afkhami S., Kondic L. Direct numerical simulation of variable surface tension flows using a Volume-of-Fluid method. *J. Comput. Phys.*, 2018, Vol. 352, No. 1, pp. 615–636.
16. Menter F.R., Kuntz M., Langtry R. Ten years of industrial experience with the sst turbulence model. *Turbulence, Heat and Mass Transfer*, 2003, Vol. 4, pp. 625–632.
17. Ferziger J., Peric M. Computational Method for Fluid Dynamics. N. Y.: Springer-Verl., 2002.
18. Singh S., Kashyap P. Finite volume method: an efficient tool for transport equation solutions. *J. Propulsion Technology*, 2023, Vol. 44, No. 6; DOI: 10.52783/tjjpt.v44.i6.3938
19. Kovenya V.M., Babintsev P.V. Application of splitting algorithms in the method of finite volumes for numerical solution of the Navier-–Stokes equations. *J. Appl. Indust. Math.*, 2018, Vol. 12, pp. 479–491; DOI: 10.1134/S1990478918030080

20. Efimov D., Polyakov A., Aleksandrov A. Discretization of homogeneous systems using Eulermethod with a state-dependent step. *Automatica*, 2019, Vol. 109. Article number 108546.
21. Fletcher K. Computational Methods in Fluid Dynamics in Two Volumes. M: Mir, 1991.
22. Waclawczyk T., Koronowicz T. Comparison of cicsam and hric high-resolution schemes for interface capturing. *J. Theor. Appl. Mech.*, 2008, Vol. 46, No. 2, pp. 325–345.
23. Kim G., Rhee H., Jeon W. Lateral sloshing analysis by cfd and experiment for a spherical tank. *Internat. J. Aeronaut. Space Sci.*, 2020, Vol. 21, pp. 816–825; DOI: 10.1007/s42405-020-00295-2
24. Ubbink O. Numerical prediction of two fluid systems with sharp interfaces. *Department of Mechanical Engrg. Imperial College of Science: Technology & Medicine*, 1997.
25. Akyildiz H., Unal N. Sloshing in a three-dimensional rectangular tank numerical simulation and experimental validation. *Ocean Engrg.*, 2010, Vol. 33, No. 16, pp.2135–2149.
26. Zhang J., Wang Y. Liu. Numerical simulation of two-phase fluid dynamics in a spacecraft propellant tank under low-gravity conditions. *Acta Astronautica*, 2021, No. 187, pp. 45–58.
27. Welch S. and Wilson J. A volume of fluid based method for fluid flows with phase change. *J. Comp. Phys.*, 2000, Vol. 160, pp. 662–682.
28. Puzan A.Yu., Kozelkov A.S. Chislennaya ocenka pogreshnosti modelirovaniya ispareniya s ispol'zovaniem odnoskorostnoj mnogofaznoj modeli zhidkosti so svobodnoj poverhnost'yu metodom konechnyh ob'yomov [Numerical assessment of the error in modeling evaporation using a single-speed multiphase fluid model with a free surface by the finite volume method]. *Voprosy Atomnoj Nauki i Tehniki* [Problems of Atomic Science and Technology], 2026, pp. 53–67 (in Russian).
29. Kozelkov A. S., Puzan A. Y. Estimation of the numerical diffusion of the finite volume method in condensation modeling using a single-rate multiphase model of a liquid with a free surface. *Engrg. Phys.*, 2024, No. 11, pp. 41–55, DOI: 10.25791/infizik.11.2024.1439.
30. Kamei S.,Hirata M. Study on condensation of a single vapor bubble into subcooled water-Part 2, experimental analysis. *Heat Trans. Jpn. Res.*, 1990.
31. Samkhaniani N., Ansar M. Numerical simulation of bubble condensation using CF-VOF. *Progress in Nuclear Energy*, 2016, Vol. 89, pp. 120–131.
32. Zeng Q., Cai J., Yin H. Numerical simulation of single bubble condensation in subcooled flow using OpenFOAM. *Progress Nucl. Energy*, 2015, Vol. 83, pp. 336–346.
33. Elperin T., Fominykh A. Heat transfer during gas hydrate formation in gas-liquid slug flow. *Heat and Mass Transfer*, 1996, Vol. 31, pp. 179–183; DOI: 10.1007/BF02333317

УДК 539.3

ВЫВОД ЭФФЕКТИВНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ПЕРЕНОСА ДЛЯ ГЕТЕРОГЕННОЙ СРЕДЫ С ИЕРАРХИЧЕСКОЙ СТРУКТУРОЙ, ИСПОЛЬЗУЯ ФОРМАЛИЗМ ОБОБЩЁННОЙ ПРОИЗВОДНОЙ

© 2026 А. В. Мишин[1,2]

[1] *Институт теоретической и прикладной механики им. С. А. Христиановича СО РАН, ул. Институтская, 4/1, г. Новосибирск 630090, Россия,*
[2] *Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, 1, г. Новосибирск 630090, Россия*

E-mail: mishinav@itam.nsc.ru

Поступила в редакцию 13.03.2026 г.; после доработки 22.06.2026 г.; принята к публикации 16.09.2026 г.

Представлены операции по гомогенизации стационарного уравнения теплопроводности с уравнением состояния типа Фурье. Гетерогенная среда является двухфазной и обладает иерархической структурой (гетерогенная среда, вложенная в гетерогенную среду). Используется метод условных моментов и формализм обобщённой производной, учитывающий конфигурацию внутренних границ гетерогенной системы. Для учёта многоуровневой структуры гомогенизация осуществляется для ограниченной неоднородной среды. Получение эффективного коэффициента проводится для трёхмерного пространства и далее обобщается для пространства произвольной размерности. Анализируется механизм появления характерных размеров фаз в эффективном коэффициенте, являющийся следствием использования формализма обобщённой производной и проведения гомогенизации для ограниченной системы. Проводимые операции показывают наличие эффективного числа степеней свободы для анализируемого поля в гетерогенной среде. Рассмотрено влияние условий на межфазных границах на итоговый эффективный коэффициент.

Ключевые слова: гетерогенная среда, микроструктура, обобщённая производная, функция Грина, условное осреднение, корреляционная функция, преобразование Фурье.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.307

ВВЕДЕНИЕ

Аналитическое исследование гетерогенных сред является комплексной задачей с рядом нерешённых проблем. Актуальным является исследование иерархической структуры гетерогенной среды или многоуровневой гетерогенности (гетерогенная среда, вложенная в гетерогенную среду, концепция «композит в композите»), когда материал (композит) имеет несколько уровней неоднородности (от микро- до макроструктуры). Процессы в таких средах могут быть разными при изменении масштаба (например, диффузия в пористых средах с разными уровнями пористости).

Приведём несколько примеров работ, где рассматриваются многоуровневые неоднородные структуры. Эти работы иллюстрируют подходы к моделированию, экспериментальным исследованиям и практическому применению таких материалов. В работе [1] проводится аналитическое и экспериментальное исследование электропроводности композитов на основе углеродных нанотрубок, учитывающее микро и наноструктуру, и туннельный эффект между нанотрубками, изучается влияние геометрии и распределения нанотрубок на образование проводящих

путей и общую электропроводность композита. Используется метод Монте-Карло и конечно-элементный поход. В статье [2] подробно обсуждаются модели перколяции и эффективной среды для описания течения и электропроводности в пористых средах, включая среды с двойной пористостью (например, трещиноватые породы). В работе [3] проводится многомасштабное моделирование термоупругих свойств композитов с периодической структурой неоднородностей. При выводе гомогенизированного уравнения теплопроводности для эффективной среды со средними эффективными свойствами применялось асимптотическое усреднение и численное моделирование. Статья [4] посвящена численному моделированию термо-гидро-механического взаимодействия в многомасштабных трещиноватых породах, используется также модель двойной пористости. В работе [5] предложена модель с использованием фракталов для описания теплопроводности в средах с многоуровневой гетерогенностью. Показано, что фрактальная размерность структуры влияет на эффективную теплопроводность. При этом актуальным в контексте настоящей работы является то, что эффективная теплопроводность гетерогенной среды зависит от её фрактальной размерности, и эффективная размерность в системе определяется через число степеней свободы, доступных для переноса тепла. В статьях [6, 7] приводится модель двойной пористости для описания гетерогенных сред. Показано, что фрактальная размерность трещин и блоков влияет на поток флюида. В ряде работ [8–12] в рамках численных методов и экспериментальных подходов исследуется влияние многоуровневой гетерогенности на механические свойства.

В настоящей работе для анализа иерархической гетерогенной среды предлагается использовать подход, основанный на гомогенизации и опирающийся на работу [13]. Получение эффективного коэффициента, входящего в осреднённые уравнения, осуществляется методом условных моментов [13–15]. Влияние микроструктуры гетерогенной среды на её осреднённые свойства учтено формализмом обобщённой производной [13], которая наличием сингулярной составляющей описывает конфигурацию внутренних границ гетерогенной среды. В рамках используемого подхода произведено построение решения на функцию Грина, где оператор составляют не обычные производные, а обобщённые. Эти производные составляют оператор исходного уравнения переноса. В итоге для получения эффективных коэффициентов методом условных моментов необходимо посчитать интегралы, содержащие функцию Грина и корреляционную функцию геометрии структуры.

Следует отметить, что на данный момент разработаны различные физико-математические модели гомогенизации гетерогенных сред [14–29], основанные как на полуэмпирических (прикладных) и эвристических подходах, так и на строгом математическом аппарате. При этом в ряде приведённых методов детальный анализ конфигурации локальных межфазных границ зачастую опускается, учитывается в упрощённой форме или реализуется приближённо, что в том числе обусловлено рамками конкретного исследования.

Операции, приведённые в настоящей работе, отличаются следующими основными аспектами относительно работы [13]. Первый связан с тем, что предлагается использовать функцию Грина для однородной и изотропной ограниченной среды, представляющую собой сферу радиуса R. Члены, связанные с конфигурацией внутренних границ (с обобщённой производной), предлагается перенести в правую часть – это второй аспект. Третье отличие связано с тем, что операции делаются для пространства произвольной размерности.

Механизм появления размеров в эффективном коэффициенте, полученном для ограниченной неоднородной среды и найденном для пространства произвольной размерности, и учёт влияния условий на внутренних границах на эффективный коэффициент представляют новизну данной работы. Вывод результата, характеризующего то, что поведение поля в гетерогенной среде имеет эффективное число степеней свободы, является также новизной относительно существующих методов по описанию неоднородных сред (обладающих иерархической структурой, в частности). Результаты являются следствием используемого аналитического подхода, использующего формализмы обобщённой производной и условного осреднения.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Исследуем стационарное распределение поля теплопроводности в микронеоднородной двухфазной среде, имеющей иерархическую структуру.

В качестве исходной модели используем модель стационарной изотропной линейной теории теплопроводности в форме

$$\nabla_j(\sigma\nabla_j\varphi) = 0, \tag{1}$$

где перенос тепла определяется Фурье-соотношением $j_i = \sigma\nabla_i\varphi$. По повторяющимся индексам (j) используется правило суммирования. В уравнении (1) запись ∇_j является обобщённой производной

$$\nabla_j\varphi(\boldsymbol{r}) = \partial_j\varphi(\boldsymbol{r}) + \sum_k \int\limits_{S_k} [\varphi]_{\boldsymbol{x}}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})\,ds_j, \tag{2}$$

где $[\varphi]_{\boldsymbol{x}}$ характеризует скачек поля на границе раздела фаз $[\varphi]_{\boldsymbol{x}} = \varphi(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{0}) - \varphi(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{0})$, ∂_j — производная по пространственной переменной, $\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})$ — трёхмерная дельта-функция, $\boldsymbol{x}$ — радиус-вектор до границы разрыва (раздела), слагаемое $\int\limits_{S_k} [\varphi]_{\boldsymbol{x}}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})\,ds_j$ характеризует вклад в поле одной из внутренних границ неоднородной среды S_k.

Уравнение (1) дополняется заданием стандартных граничных условий на внутренних границах: $[j_i] = 0$, $[\varphi] = 0$ и внешней границе [13].

В работе [13] было показано, что обобщённая производная (впервые введена Шварцем [30] в рамках функционального анализа Соболева), входящая в уравнение (1) с модифицированным оператором, является следствием варьирования функционала энергии

$$E = \frac{1}{2}\int\limits_V \sum_\nu \sigma_\nu f_\nu \partial_j(\varphi_\nu f_\nu)\partial_j(\varphi_\nu f_\nu)\,d\boldsymbol{r}, \tag{3}$$

где $f_\nu(\boldsymbol{r})$ — индикаторная функция, характеризующая фазу ν в точке, $\nu = 1,\ 2$. Если в точке находится фаза ν, то $f_\nu(\boldsymbol{r}) = 1$, иначе имеем $f_\nu(\boldsymbol{r}) = 0$. Индикаторная функция неотделима от анализируемого поля $\varphi_\nu f_\nu$ и коэффициента переноса $\sigma_\nu f_\nu$. Формула для обобщённой производной (2) следует из формулы $\partial_j(\varphi f) = \nabla_j\varphi$. Сингулярная составляющая для обобщённой производной $\boldsymbol{\nabla}$ в (2) является следствием выражения $\varphi(\boldsymbol{r})\partial_j f(\boldsymbol{r})$. При варьировании функционала (3) использованы равенства: $f_\nu f_\nu = f_\nu$, $f_\nu\partial_j f_\nu = \partial_j f_\nu$, $f_\nu\partial_j\partial_j f_\nu = \partial_j\partial_j f_\nu$, обоснование которых представлено в [13].

Полученный модифицированный оператор в (1) учитывает конфигурацию областей и границ, разделяющих фазы и определяет обобщённую производную, что является следствием введённого функционала энергии с индикаторной функцией (3). В работе [31] корректность уравнений с модифицированный оператором устанавливается через формализм функций Грина и подход теории смесей [24]. На основе формализма обобщённой производной и пространственного осреднения в [31] получена пространственная теорема осреднения [24], являющаяся фундаментом теории смесей.

Целью является получение эффективного коэффициента теплопроводности σ^*, входящего в осреднённые уравнения модели (1). Для дальнейших операций в рамках используемого метода условных моментов [14, 15] уравнения (1) с учётом соотношения (2) предлагается переписать в виде

$$\sigma^*\partial_j\partial_j\varphi = -\sigma^*\sum_k \int\limits_{S_k} [\partial_j\varphi]_{\boldsymbol{x}}\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{x})\,ds_j - \nabla_j(\sigma-\sigma^*)\nabla_j\varphi, \tag{4}$$

В уравнении (4) учтено граничное условие на поверхностях раздела фаз $[\varphi] = 0$. Используемую модель вначале рассмотрим в трёхмерном пространстве.

Координатами в используемой модели выступают микроточки, в каждой из которых находится одна из фаз со своими физическими свойствами. Если в микроточке находится фаза 1, то материальный коэффициент принимает значение $\sigma = \sigma_1$, аналогично и исследуемые поля φ, $\partial_i\varphi$, $j_i = \sigma\partial_i\varphi$ (j_i характеризует поток) при этом принимают значения, соответствующие фазе 1.

В данной работе моделирование (гомогенизацию) иерархической структуры произведём следующим образом. Иерархическую неоднородную среду на каждом из уровней считаем обладающей статистически однородными и изотропными свойствами. Рассмотрим один из уровней неоднородной двухфазной системы, считая его шаром радиуса R. То есть гомогенизацию проведём для ограниченной гетерогенной структуры, направленную учесть концепт уровня (ячейки) иерархической гетерогенной среды. При этом R — минимальный размер гомогенизации, на котором статистически проявляются характерные микроструктурные свойства среды. При увеличении R эти свойства не меняются. R — масштаб осреднения (макроточка), на котором существует постоянное осреднённое поле, на большем масштабе оно не будет постоянным. Изменением макроскопического поля на масштабе R пренебрегаем. Размер всей анализируемой области гетерогенной среды считаем много больше масштабов осреднения и масштаба изменения осреднённого поля.

Введём микроструктурные параметры фаз. Фазой 2 являются шары с радиусом a, их окружение — фаза 1 с характерным масштабом b. Введём также характерный масштаб структуры $\Delta = a+b$. Объёмные концентрации фаз c_1, c_2, $c_1+c_2 = 1$. Осреднение представляет собой переход от микро уровня к одному из промежуточных уровней — к мезоуровню. Найденный эффективный коэффициент при этом будет представлять осреднённую характеристику для промежуточного масштаба — масштаба мезоуровня, который при переходе к макроуровню можно считать одной из фаз для гетерогенной среды. В зависимости от структуры иерархической гетерогенной среды переходов от микро к мезо может быть несколько, аналогично для переходов от мезо к макро. Каждая из таких гомогенизаций характеризуется своими параметрами a, b, R, c_2, также, как и своими проводимостями фаз σ_1, σ_2.

Ещё ряд предположений будет сделан при анализе вклада от межфазных границ: Их вычисление произведём вдали от границы шара (осреднения) радиуса R, т.е. с использованием асимптотик; изменением осреднённого поля φ на масштабе элементарного структурного элемента фаз пренебрегаем.

2. ФУНКЦИЯ ГРИНА АНАЛИЗИРУЕМОЙ СИСТЕМЫ

Определяемая действующим оператором функция Грина отображает отклик поля в среде на приложенное воздействие (характеризует единичный источник с учётом гран. условий). Этот отклик в анализируемом случае предполагает единичный источник в ограниченной среде радиуса R с оператором $\hat{L} = \sigma^*\Delta$ в постановке задачи Дирихле

$$\sigma^*\Delta G = -\delta(\boldsymbol{r}), \quad G|_R = 0.$$

Функция Грина для системы, являющейся шаром радиуса R в трёхмерном пространстве для оператора $\hat{L} = \sigma^*\Delta$, принимает вид [32]:

$$G = \frac{1}{4\pi\sigma^*}\frac{1}{|\boldsymbol{r}^{(1)} - \boldsymbol{r}^{(2))}|} - \frac{1}{4\pi\sigma^*}\frac{R}{|\boldsymbol{r}^{(2)}|}\frac{1}{|\boldsymbol{r}^{(1)} - \boldsymbol{r}^{(3)}|}, \tag{5}$$

где $\boldsymbol{r}^{(3)} = \boldsymbol{r}^{(2)}\dfrac{R^2}{|\boldsymbol{r}^{(2)}|^2}$.

Информация о коллективном влиянии фаз на распространяющееся по неоднородной системе поле либо должна быть отображена в операторе, определяющем функцию Грина, либо

в источниковом члене в анализируемом дифференциальном уравнении. В работе [13] использован первый вариант. В настоящей работе влияние конфигурации границ на поле в исследуемой структуре вынесено в источник в уравнении (4), что требует отдельного анализа.

3. НАХОЖДЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Произведём получение эффективного модуля σ^*, отображающего искомую информацию о гетерогенной структуре и входящего в осреднённые соотношения

$$\partial_i\langle j_i\rangle = 0, \quad \langle j_i\rangle = \sigma^*\partial_i\langle\varphi\rangle,$$

где $\langle j_i\rangle$ – осреднённый поток, $\langle j_i\rangle = c_1\langle j_i\rangle_1 + c_2\langle j_i\rangle_2$. Анализируя многоуровневую неоднородную структуру, гомогенизацию проведём для одного из её уровней.

Для получения коэффициента σ^* используем метод условных моментов [14, 15]. В работе [13] в рамках данного подхода с учётом формализма обобщённой производной получен эффективный коэффициент линейной теплопроводности, интегрально отображающий микроструктуру гетерогенной системы. В настоящей работе для получения эффективного модуля σ^* нужно преобразовать источниковое слагаемое в модели (4) с учётом другой функции Грина.

Решение уравнения (4), записанное через функцию Грина, имеет вид

$$\varphi(\boldsymbol{r}^{(1)}) = \langle\varphi\rangle - \int G(\boldsymbol{r}^{(1)},\boldsymbol{r}^{(2)})\nabla_j(\sigma(\boldsymbol{r}^{(2)}) - \sigma^*)\nabla_j\varphi(\boldsymbol{r}^{(2)})\,d\boldsymbol{r}^{(2)} - \int G(\boldsymbol{r}^{(1)},\boldsymbol{r}^{(2)})\sigma^*\sum_k\int\limits_{S_k}[\partial_j\varphi]_{\boldsymbol{x}}\delta(\boldsymbol{r}^{(2)}-\boldsymbol{x})\,ds_j\,d\boldsymbol{r}^{(2)}. \quad (6)$$

Слагаемое $\langle\varphi\rangle$ справа от знака равно соответствует условию на границе системы, которое можно задать как в виде $\varphi|_R = \langle\varphi\rangle$, так и виде $\varphi|_R = \langle\partial_i\varphi\rangle r_i$ (это с учётом дальнейшего дифференцирования уравнения (6)).

Используя соотношение для обобщённой производной (2) и граничные условия $[\sigma\partial_j\varphi]_{\boldsymbol{x}}$=0, $[\varphi]_{\boldsymbol{x}} = 0$ для конфигурации внутренних границ, получим выражение

$$\varphi(\boldsymbol{r}^{(1)}) = \langle\varphi\rangle - \int\partial_j G(\boldsymbol{r}^{(1)},\boldsymbol{r}^{(2)})(\sigma(\boldsymbol{r}^{(2)}) - \sigma^*)\partial_j\varphi\,d\boldsymbol{r} - \sum_k\int\limits_{S_k}\partial_j^{(2)}G(\boldsymbol{r}^{(1)},\boldsymbol{r}^{(2)})(\sigma'\varphi)_{\boldsymbol{x}}\,ds_j. \quad (7)$$

При нахождении (7) использованы равенства $[\sigma\varphi]_{\boldsymbol{x}} = (\sigma'\varphi)_{\boldsymbol{x}}$; $\sigma' = \sigma_1 - \sigma_2$ и цепочка равенств

$$\sum_k\int G(\boldsymbol{r}^{(1)},\boldsymbol{r}^{(2)})\int\limits_{S_k}[\sigma\varphi]_{\boldsymbol{x}}\partial_j^{(2)}\delta(\boldsymbol{r}^{(2)}-\boldsymbol{x})\,ds_j d\boldsymbol{r}^{(2)} = \sum_k\int\partial_j^{(2)}G(\boldsymbol{r}^{(1)},\boldsymbol{r}^{(2)})\int\limits_{S_k}[\sigma\varphi]_{\boldsymbol{x}}\delta(\boldsymbol{r}^{(2)}-\boldsymbol{x})\,ds_j d\boldsymbol{r}^{(2)} = \sum_k\int\limits_{S_k}\partial_j^{(2)}G(\boldsymbol{r}^{(1)},\boldsymbol{x})(\sigma'\varphi)_{\boldsymbol{x}}\,ds_j,$$

где ds_j — элемент поверхности раздела фаз в точке $\boldsymbol{x}$. (При дальнейших операциях с поверхностными интегралами в (7) вместо $\boldsymbol{x}$ местами будет также использоваться $\boldsymbol{r}^{(2)}$, $\boldsymbol{r}^{(2)} = \boldsymbol{x}$).

Последующие вычисления направлены на преобразование поверхностного слагаемого $\sum_k\int\limits_{S_k}\partial_j^{(2)}G(\boldsymbol{r}^{(1)},\boldsymbol{x})(\sigma'\varphi)_{\boldsymbol{x}}ds_j$ в (7) к виду $X\varphi(\boldsymbol{r}^{(1)})$, где X – искомый член, зависящий от фазы.

Для k-ого элемента с поверхностью S_k имеем цепочку равенств:

$$\int\limits_{S_k} \partial_j^{(2)} G(\boldsymbol{r^{(1)}} - \boldsymbol{r^{(2)}})\ (\sigma'\varphi)_{\boldsymbol{x}}\, ds_j = -\varphi(\boldsymbol{r^{(2)}}) \int\limits_{S_k} \frac{1}{4\pi\sigma^*}\ \frac{(\boldsymbol{r^{(1)}} - \boldsymbol{r^{(2)}})_j}{|\boldsymbol{r^{(1)}} - \boldsymbol{r^{(2)}}|^3} (\sigma')_{\boldsymbol{x}}\, ds_j$$

$$\cong -\varphi(\boldsymbol{r^{(2)}}) \int\limits_{S_k} \frac{1}{4\pi\sigma^*}\ \frac{a}{|\boldsymbol{r^{(1)}} - \boldsymbol{r^{(2)}}|^3} (\sigma')_{\boldsymbol{x}} a^2\, d\Omega \cong \varphi(\boldsymbol{r^{(2)}})(\sigma')_{\boldsymbol{x}} \frac{1}{4\pi\sigma^*} 4\pi \frac{\pi a}{4} \frac{3a^3}{|\boldsymbol{r^{(1)}} - \boldsymbol{r^{(2)}}|^4}, \quad (8)$$

где $ds_j = a^2 n_j d\Omega$, слагаемое $(\boldsymbol{r^{(1)}})_j n_j$ при интегрировании по углам даёт нуль,

$$(\boldsymbol{r^{(2)}})_j n_j = (\boldsymbol{l} + a\boldsymbol{n})_j n_j = (\boldsymbol{l})_j n_j + a n_j n_j = 0 + a = a.$$

Изменением поля φ на масштабе элементарного структурного элемента фаз (масштабы a и b) пренебрегаем. Использовано упрощение: $\varphi(\boldsymbol{r^{(2)}}) \cong \varphi(\boldsymbol{r^{(1)}})$, основной вклад от межфазных границ осуществляется вблизи точки $\boldsymbol{r^{(1)}}$, связью флуктуаций поля с геометрическими особенностями системы, влияющими на вычисление интеграла (8), тоже пренебрегаем. Далее, член $|\boldsymbol{r^{(1)}} - \boldsymbol{r^{(2)}}|^{-3}$ не раскладывался по n_j (на сферические функции), т. к. эти члены разложения дадут относительно малый вклад при интегрировании по $d\Omega$. Т. е. член $|\boldsymbol{r^{(1)}} - \boldsymbol{r^{(2)}}|^{-3}$ не влияет на интегрирование по $d\Omega$. Вычисление производим вдали от границы, т.е. с использованием асимптотик: $|\boldsymbol{r_1}| \sim |\boldsymbol{r_2}| \ll R$, $|\boldsymbol{r_1} - \boldsymbol{r_2}| \ll R$, $|\boldsymbol{r_3}| = \dfrac{R^2}{|\boldsymbol{r_2}|} \gg R$. При этом второе слагаемое в функции Грина с $\boldsymbol{r}^{(3)}$ при вычислении даёт малый вклад и оно не рассматривается. При вычислении интеграла (8) учтено, что $(\sigma')_{\boldsymbol{x}}$ для рассматриваемых замкнутых границ принимает значения $\pm\ (\sigma')_{\boldsymbol{x}}$, что зависит от перехода между фазами. Радиус вектор $\boldsymbol{r}^{(1)} - \boldsymbol{r}^{(2)}$ пересекая сферу радиуса a два раза, образует хорду, среднее значение которой $\frac{\pi a}{4}$. При вычислении (8) член $|\boldsymbol{r^{(1)}} - \boldsymbol{r^{(2)}}|^{-3}$ продифференцирован и умножен на $\dfrac{\pi a}{4}$. Это является следствием того, что при пересечении сферы $(\sigma')_{\boldsymbol{x}}$ принимает два противоположных значения, и значения $|\boldsymbol{r^{(1)}} - \boldsymbol{r^{(2)}}|^{-3}$ вычитаются друг из друга.

Считая конфигурацию внутренних границ статистически однородно и изотропно заполняющими пространство, как и в работе [13], перейдём от суммы по внутренним границам в (7) к интегралу

$$\int \partial_j^{(2)} G(\boldsymbol{r^{(1)}} - \boldsymbol{r^{(2)}}) \int\limits_{S_k} (\sigma'\varphi)_{\boldsymbol{x}}\, ds_j \frac{4\pi\Delta|\boldsymbol{r^{(1)}} - \boldsymbol{r^{(2)}}|^2}{\Delta^3 4\pi/3} \frac{d|\boldsymbol{r^{(1)}} - \boldsymbol{r^{(2)}}|}{\Delta}. \quad (9)$$

Слагаемое $\dfrac{4\pi\Delta|\boldsymbol{r^{(1)}} - \boldsymbol{r^{(2)}}|^2}{\Delta^3 4\pi/3}$ выражает число внутренних границ для сферы радиуса $|\boldsymbol{r^{(1)}} - \boldsymbol{r^{(2)}}|$ с толщиной Δ. Шаг интегрирования соответствует $\Delta = a + b$. Дальнейшие выкладки ориентированы на получение поправки в первом приближении, связанной с внешней границей, в связи с этим от функции Грина учтём только часть $\dfrac{1}{4\pi\sigma^*} \dfrac{1}{|\boldsymbol{r^{(1)}} - \boldsymbol{r^{(2)}}|}$.

Вычисление интеграла (9) с учётом проделанных операций (8) зависит от того, какая фаза находится в точке $\boldsymbol{r}^{(1)}$. Конкретной фазой определяется нижний предел в интеграле: a — если в точке $\boldsymbol{r}^{(1)}$ находится фаза 2, b — если в точке $\boldsymbol{r}^{(1)}$ находится фаза 1.

Для фазы 1 в точке $\boldsymbol{r}^{(1)}$ имеем результат $X = X_1 = \dfrac{\sigma'}{\sigma^*}\left(\dfrac{1}{R} - \dfrac{1}{b}\right)\dfrac{a^4}{\Delta^3}$. Для фазы 2 в точке $\boldsymbol{r}^{(1)}$: $X = X_2 = \dfrac{\sigma'}{\sigma^*}\left(\dfrac{1}{R} - \dfrac{1}{a}\right)\dfrac{a^4}{\Delta^3}$.

Таким образом, в результате проведённых операций с межфазными слагаемыми получим выражение (координатные индексы здесь и далее опущены)

$$\varphi = \langle\varphi\rangle - \int \partial_j G(\sigma - \sigma^*)\partial_j\varphi \, d\boldsymbol{r} - X\varphi, \tag{10}$$

которое продифференцируем в пределах одной фазы

$$(1 + X)\partial_i\varphi = \langle\partial_i\varphi\rangle - \int \partial_i\partial_j G(\sigma - \sigma^*)\partial_j\varphi \, d\boldsymbol{r}. \tag{11}$$

Применим формализм условного осреднения к выражению (11). Для этого умножим его на $f\big(\partial_i\varphi^{(1)},\ \partial_i\varphi^{(2)},\ X^{(1)}, \sigma^{(2)}|_\nu^{(1)}\big)$. и проинтегрируем по конфигурации полей. В результате чего имеем равенство:

$$(1 + X_\nu)\langle\partial_i\varphi\rangle_\nu = \langle\partial_i\varphi\rangle - \sum_k \int_V \partial_i\partial_j G p_{\nu k}(\sigma_k - \sigma^*)\langle\partial_j\varphi\rangle_k \, d\boldsymbol{r}, \tag{12}$$

где слагаемое $p_{\nu k}^{(1,2)} = w\big({}_k^{(2)}|_\nu^{(1)}\big). = c_k + (\delta_{\nu k} - c_k)\psi^{(1,2)}$ характеризует вероятностную функцию геометрии и времени структуры, которая определяет вероятность нахождения фазы k, $k = 1, 2$, в точке $\boldsymbol{r}^{(2)}$ при условии, что фаза ν расположена в точке $\boldsymbol{r}^{(1)}$; $\psi^{(1,2)}$ — корреляционная функция геометрии и времени неоднородной структуры; $\nu,\ k = 1, 2$.

В результате условного осреднения возникают члены $\langle\partial_i\varphi^{(2)k}|_\nu^{(1)})\rangle$, обозначающие условно осреднённый градиент температуры в точке $\boldsymbol{r}^{(2)}$ для фазы k при условии, что в точке $\boldsymbol{r}^{(1)}$ находится компонента ν. Для подобных членов, как и в работах [13–15], считается выполненным равенство $\langle\partial_i\varphi^{(2)k}|_\nu^{(1)}).\rangle = \langle\partial_i\varphi\rangle_k(\boldsymbol{r}^{(2)})$.

На основе выражения (12) и соотношений

$$\begin{gathered} X' = X_1 - X_2, \quad X'' = c_1X_2 + c_2X_1, \\ \sigma' = \sigma_1 - \sigma_2, \quad \sigma'' = c_1\sigma_2 + c_2\sigma_1 - \sigma^*, \\ \langle\partial_i\varphi\rangle_1 = \langle\partial_i\varphi\rangle + c_2\langle\partial_i\varphi\rangle', \quad \langle\partial_i\varphi\rangle_2 = \langle\partial_i\varphi\rangle - c_1\langle\partial_i\varphi\rangle' \end{gathered}$$

найдём разницу для двух фаз $\langle\partial_i\varphi\rangle' = \langle\partial_i\varphi\rangle_1 - \langle\partial_i\varphi\rangle_2$:

$$\langle\partial_i\varphi\rangle' + X'\langle\partial_i\varphi\rangle + X''\langle\partial_i\varphi\rangle' = -\int \partial_i\partial_j G(\boldsymbol{r})\psi(\sigma'\langle\partial_j\varphi\rangle + \sigma''\langle\partial_j\varphi\rangle') \, d\boldsymbol{r}. \tag{13}$$

Действие прямого преобразования Фурье позволяет выделить выражение

$$R_{ij}(\boldsymbol{k}) = \int \partial_i\partial_j G(\boldsymbol{r})\psi e^{i\boldsymbol{k}\boldsymbol{r}} \, d\boldsymbol{r} = N\delta_{ij} \tag{14}$$

относительно входящих полей в интеграл, содержащее функцию Грина $G(\boldsymbol{r})$ и корреляционную функцию геометрии структуры $\psi(\boldsymbol{r})$. С учётом выполнения прямого и обратного преобразования Фурье выражение (13) преобразуется к виду

$$\langle\partial_j\varphi\rangle'(\delta_{ij}(1 + X'') + R_{ij}\sigma'') = -(R_{ij}\sigma' + \delta_{ij}X')\langle\partial_j\varphi\rangle,$$

который перепишем без тензорной записи

$$\langle\partial_i\varphi\rangle' = -(1 + X'' + N\sigma'')^{-1}(X' + N\sigma')\langle\partial_i\varphi\rangle. \tag{15}$$

Произведём вычисление интегралов $R_{ij}(\boldsymbol{k})$ в случае $\boldsymbol{k}=\boldsymbol{0}$. При $\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{0}$ искомый эффективный коэффициент будет представлять собой оператор, отображающий влияние микроструктуры гетерогенной среды на исследуемое поле. Произведём цепочку равенств:

$$R_{ij}(\boldsymbol{0}) = -\frac{1}{4\pi\sigma^*}\int\limits_V \partial_i\partial_j\left(\frac{1}{|\boldsymbol{r}^{(1)}-\boldsymbol{r}^{(2)}|}-\frac{R}{|\boldsymbol{r}^{(2)}|}\frac{1}{|\boldsymbol{r}^{(1)}-\boldsymbol{r}^{(3)}|}\right)e^{-\alpha r}d\boldsymbol{r}$$

$$= \frac{1}{4\pi\sigma^*}\frac{4\pi}{3}\delta_{ij} - \frac{1}{\sigma^*}\frac{1}{(R\alpha)^3}\delta_{ij}\big(2+\big((R\alpha)^2+2R\alpha+2\big)e^{-\alpha R}\big) \cong \frac{1}{3\sigma^*}\delta_{ij} - 2\frac{1}{\sigma^*}\frac{1}{(R\alpha)^3}\delta_{ij} = N\delta_{ij},$$

где функцию $\psi(\boldsymbol{r})$ возьмём в виде [33]: $\psi(\boldsymbol{r}) = e^{-\alpha r}$, $r = |\boldsymbol{r}^{(1)}-\boldsymbol{r}^{(2)}|$, где α — структурный коэффициент, который для шара определим как $\alpha = \left(\frac{\pi}{2}c_1 a\right)^{-1}$. Вычисление интеграла $\int\limits_V \partial_i\partial_j\left(\frac{1}{|\boldsymbol{r}^{(1)}-\boldsymbol{r}^{(2)}|}\right)e^{-\alpha r}d\boldsymbol{r}$ даёт результат $\frac{1}{4\pi\sigma^*}\frac{4\pi}{3}\delta_{ij}$ и является следствием сингулярной составляющей, формальная составляющая вклада не даёт (вследствие интегрирования по углам). Данный интеграл не содержит информации о размерах системы. Вычисление интеграла $\int\limits_V \partial_i\partial_j\left(\frac{R}{|\boldsymbol{r}^{(2)}|}\frac{1}{|\boldsymbol{r}^{(1)}-\boldsymbol{r}^{(3)}|}\right)e^{-\alpha r}\,d\boldsymbol{r}$ произведено с использованием асимптотик: $|\boldsymbol{r_1}| \sim |\boldsymbol{r_2}| \ll R$, $|\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2}| \ll R$, $|\boldsymbol{r_3}| = \frac{R^2}{|\boldsymbol{r_2}|} \gg R$, т. е. рассмотрение производится вдали от границы. Асимптотика имеет место в случае $\alpha R \gg 1$. Основной вклад при этом даёт выражение $-2\frac{1}{\sigma^*}\frac{1}{(R\alpha)^3}\delta_{ij}$.

Далее для нахождения эффективного коэффициента произведём суммирование выражения (12) по ν ($\nu=1,\ 2$) с учётом умножения его на c_ν:

$$\langle X\rangle\langle\partial_i\varphi\rangle - c_1c_2X'\langle\partial_i\varphi\rangle' = -\int \partial_i\partial_j G(\boldsymbol{r})(\langle\sigma\rangle\langle\partial_j\varphi\rangle + c_1c_2\sigma'\langle\partial_j\varphi\rangle' - \sigma^*\langle\partial_j\varphi\rangle)\,d\boldsymbol{r}, \qquad (16)$$

$$\langle\sigma\rangle = c_1\sigma_1 + c_2\sigma_2, \quad \langle X\rangle = c_1X_1 + c_2X_2,$$

Выполняя прямое и обратное преобразования Фурье уравнения (16) с учётом уравнения (15), обозначения

$$Y\delta_{ij} = \int \partial_i\partial_j G(\boldsymbol{r})e^{i\boldsymbol{kr}}\,d\boldsymbol{r} = -\frac{1}{4\pi\sigma^*}\frac{4\pi}{3}\delta_{ij}$$

и приравнивания общего слагаемого при $\langle\partial_i\varphi\rangle$ к нулю, получим формулу

$$\langle X\rangle - c_1c_2X'\frac{X'+N\sigma'}{1+X''+N\sigma''} = -Y\left(\langle\sigma\rangle - c_1c_2\sigma'\frac{X'+N\sigma'}{1+X''+N\sigma''} - \sigma^*\right), \qquad (17)$$

которую далее с учётом выражений для R и X_ν перепишем к виду

$$\sigma^* = \langle\sigma\rangle - c_1c_2\sigma'\frac{X'+N\sigma'}{1+X''+N\sigma''} + \frac{1}{Y}\left(\langle X\rangle - c_1c_2X'\frac{X'+N\sigma'}{1+X''+N\sigma''}\right), \qquad (18)$$

$$Y = -\frac{1}{3\sigma^*}\delta_{ij}, \quad N = \frac{1}{3\sigma^*}\left(1-6\left(\frac{\pi}{2}c_1\right)^3\frac{a^3}{R^3}\right), \quad \langle X\rangle = \frac{\sigma'}{\sigma^*}\frac{a^4}{\Delta^3}\left(\frac{1}{R}-\frac{c_2}{a}-\frac{c_1}{b}\right),$$

$$X' = \frac{\sigma'}{\sigma^*}\frac{a^4}{\Delta^3}\left(\frac{1}{a}-\frac{1}{b}\right), \quad X'' = \frac{\sigma'}{\sigma^*}\frac{a^4}{\Delta^3}\left(\frac{1}{R}-\frac{c_1}{a}-\frac{c_2}{b}\right), \quad \Delta = a+b.$$

Выражения для $\langle\sigma\rangle, \sigma',\ \sigma''$ даны выше и не содержат информации о геометрических свойствах гетерогенной среды.

Найденный эффективный коэффициент (18) содержит информацию о геометрических свойствах гетерогенной среды в явном виде, что включает: характерные размеры элементарных структурных элементов фаз и размер анализируемой системы. При этом выделяются два отношения для размеров $\dfrac{a}{b}$ и $\dfrac{a}{R}$. Информация о размерах при проведении гомогенизации получена на основе концепции обобщённой производной, учитывающей коллективное взаимодействие фаз.

При $X_\nu = 0$ и бесконечной среде $R \to \infty$ полученный эффективный коэффициент принимает вид

$$\sigma^* = \langle\sigma\rangle - c_1 c_2 \frac{(\sigma')^2}{\sigma'' + 2\sigma^*} \tag{19}$$

и согласуется с рядом существующих подходов в монографиях [14, 16, 17]. Формула (19) является частным случаем результата (18), учитывающего конфигурацию внутренних границ $X_\nu \neq 0$ (даже в случае бесконечной среды).

Следует отметить, что формула (18) не является симметричной относительно замен $c_1 \leftrightarrow c_2$, $\sigma_1 \leftrightarrow \sigma_2$ в отличие от формулы (19). Это является следствием геометрии структуры, которая, в свою очередь, является следствием использования формализма обобщённой производной.

Таким образом, гомогенизация проведена для одного из уровней иерархической неоднородной среды. И для получения искомого эффективного коэффициента для всей среды следует проделать цепочку аналогичных осреднений – переходов между уровнями от микро к макро, подставляя в найденный результат.

4. ВЫЧИСЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНОГО КОЭФФИЦИЕНТА В ПРОСТРАНСТВЕ ПРОИЗВОЛЬНОЙ РАЗМЕРНОСТИ, ОПИРАЯСЬ НА ПОЛУЧЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Предположим, что конфигурацией межфазных слагаемых можно пренебречь, т. е. $X = 0$ (соответственно, $X' = X'' = 0$) и рассмотрим пространство произвольной размерности n. И осреднение проведём для бесконечной среды. Тогда изменения коснутся функции Грина и, соответственно, параметра N при вычислении интегралов (14) с учётом соотношения $\delta_{ij}\delta_{ij} = n$. Фактор бесконечной среды приводит к наличию только сингулярной составляющей от действия вторых производных на функцию Грина. Итоговый эффективный коэффициент примет вид

$$\sigma^* = \langle\sigma\rangle - c_1 c_2 \frac{N_n(\sigma')^2}{1 + N_n\sigma''}, \quad N_n = \frac{1}{n\sigma^*}. \tag{20}$$

При $n = 3$ имеем результат (19).

Если считать среду ограниченной в виде шара радиусом R в пространстве размерности n, то нужно уловить взаимосвязь, как меняется функция Грина. В источнике [32] есть соответствующие решения как для трёхмерного, так и для двумерного и одномерного случаев. Действуя по аналогии, решение для произвольной размерности пространства осуществляется следующим образом: член $\dfrac{R}{|\boldsymbol{r}^{(2)}|}\dfrac{1}{|\boldsymbol{r}^{(1)} - \boldsymbol{r}^{(3)}|}$ возводится в степень $n-2$, $n \geqslant 3$. Здесь также пренебрежём вкладом от конфигурации межфазных слагаемых $X = 0$. Вычисление интегралов $R_{ij}(\mathbf{0})$ осуществляется с учётом соотношения $\delta_{ij}\delta_{ij} = n$ и интегрированием по частям для члена с радиусом R. В итоге имеем результат:

$$R_{ij}(\mathbf{0}) = -\frac{1}{4\pi\sigma^*}\int\limits_{V_n} \partial_i\partial_j\left(\frac{1}{|\boldsymbol{r}^{(1)} - \boldsymbol{r}^{(2)}|} - \frac{R}{|\boldsymbol{r}^{(2)}|}\frac{1}{|\boldsymbol{r}^{(1)} - \boldsymbol{r}^{(3)}|}\right)e^{-\alpha r}\, d^n\boldsymbol{r}$$

$$\approx \frac{1}{n\sigma^*}\delta_{ij} - (n-1)!\frac{1}{\sigma^*}\frac{1}{(R\alpha)^n}\delta_{ij} = N_n\delta_{ij}.$$

Искомый эффективный коэффициент σ^* идентичен коэффициенту (20) в точности до изменения N_n:

$$N_n = \frac{1}{n\sigma^*} - (n-1)!\frac{1}{\sigma^*}\frac{1}{(R\alpha)^n}. \tag{21}$$

Согласно полученному эффективному коэффициенту (20) и результату (21), при нулевом вкладе от конфигурации межфазных границ $X = 0$ гомогенизация ограниченной гетерогенной среды радиуса R в пространстве исследуемой размерности n_0 эквивалентна с точностью до соотношения

$$n = \left(\frac{1}{n_0} - (n_0-1)!\frac{1}{(R\alpha)^{n_0}}\right)^{-1}$$

гомогенизации гетерогенной среды бесконечного размера, но в пространстве эффективной размерности n (итогового оператора это изменение не коснулось).

Выполнение операций для произвольной размерности пространства показывает не только суть зависимости σ^* от размерности эффективного коэффициента. Представленное осреднение показывает, что в общем случае исследуемое поле (электропроводность, теплопроводность) в гетерогенной среде распространяется в пространстве эффективной размерности (с эффективным числом степеней свободы), отличающейся от геометрической размерности пространства. Геометрические свойства фаз в иерархической гетерогенной среде влияют на топологические (на связанность фаз).

Эффективная размерность пространства n в системе — это размерность при описании макроскопического поведения системы, возникающая при усреднении, учитывающем её микроскопическую неоднородность. Эффективная размерность n связана с числом доступных степеней свободы для распространения поля. Эффективное число (внутренних) степеней свободы $2n$ характеризует, сколько независимых «каналов» или «путей» доступно для распространения поля в среде. В классической физике размерность пространства определяет количество независимых координат, необходимых для описания положения точки (например, $n = 3$ для трёхмерного пространства).

Для представленных выше вычислений рассмотрено равенство для членов $X = 0$, характеризующих конфигурацию межфазных границ. Данное равенство также может быть достигнуто изменением граничных условий и гипотез при выводе X. Равенство $X = 0$ имеет место в случае малых объёмных концентраций включений: $\Delta \sim b \gg a$. При этом для $X \neq 0$ с точностью до замены в (18) результат сводится к эффективному коэффициенту (20) в пространстве эффективной размерности n.

Результатом работы [13] является определённый параметр γ в эффективном коэффициенте, отличающемся от результата (18) настоящей работы. Однако, согласно формуле (20) для работы [13] следует вывод о пространстве эффективной размерности. В дальнейшем подходы будут сопоставлены и итоговые эффективные коэффициенты проанализированы.

Используемые ограничения при выводе коэффициента σ^* указывают на малость радиуса a относительно радиуса R (малость параметра $(R\alpha)^{(-1)}$). Но, следует отметить, что параметр a – это статистическая величина, характеризующая элементарный структурный элемент фазы, который не является шаром в общем случае. В ряде работ из обзора [1–12] одна из фаз представляет собой макроскопически связанную волокнистую структуру, которая способна образовать макроскопически связанный кластер при относительно (шаров) малой объёмной концентрации. Этот аспект является важным для настоящей работы в контексте эффективных степеней свободы для исследуемого поля. Применимость условия $a \leqslant R$, где размер a характеризует не шар и определяет макроскопически связанную структуру из включений при $c_2 \ll 1$, нуждается в последующем обосновании.

При выводе коэффициента σ^* не указывается информация о контактах фазы включений между собой. Те же шары в роли включений могут образовывать связанную структуру

(волокнистого типа). Возможность описывать гетерогенные среды с объёмной концентрацией включений $c_2 \sim c_1$ также следует обосновать. Межфазные контакты могут быть учтены формализмом обобщённой производной.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате проведённой гомогенизации стационарной модели линейной теплопроводности для двухфазной гетерогенной среды заданного размера получен эффективный коэффициент теплопроводности для пространства произвольной размерности.

Проведённое осреднение для ограниченной системы со статистически однородными и изотропными свойствами направлено учесть ячейку для иерархически устроенной гетерогенной среды. Выполненные операции по виду эффективного коэффициента показывают, что анализируемое поле имеет эффективное число степеней свободы в рассматриваемой гетерогенной среде с иерархической структурой, то есть исследуемое поле распространяется в пространстве размерности, отличной от исходной.

В итоговый эффективный коэффициент входит отношение характерных размеров фаз и отношение размера фазы к размеру рассматриваемой области гетерогенной среды. Первый механизм появления размеров связан с вычислением интегралов, содержащих функцию Грина (решение для оператора Лапласа в шаре заданного радиуса) и корреляционную функцию геометрии структуры. Данные интегралы возникают в используемом методе условных моментов при применении к решению, записанному через функцию Грина, условного осреднения и преобразования Фурье. Второй механизм связан с анализом членов, характеризующих совокупность межфазных границ и возникающих при использовании формализма обобщённой производной.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках проекта № 075-15-2025-459 «Научное обоснование и создание инфраструктуры на основе использования синхротронного излучения для диагностики функционально-градиентных материалов»

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Li C., Thostenson E.T., Chou T.-W.* Modeling and characterization of the electrical conductivity of carbon nanotube-based polymer composites // Polymer. 2011. V. 52, N 13. P. 2964–2973.
2. *Sahimi M.* Flow phenomena in rocks: from continuum models to fractals, percolation, cellular automata, and simulated annealing // Reviews of Modern Physics. 1993. V. 65, N 4. P. 1393–1534.
3. *Savatorova V.L., Talonov A.V., Vlasov A.N., Volkov-Bogorodsky D.B.* Multiscale modeling of thermoelastic properties of composites with periodic structure of heterogeneities // Materials Physics and Mechanics. 2012. V. 13. P. 130–142.
4. *Rutqvist J., Wu Y.-S., Tsang C.-F., Bodvarsson G.* A numerical model for thermo-hydro-mechanical coupling in fractured rock // Internat. J. Rock Mechanics Mining Sci. 2002. V. 39, N 4. P. 429–442.
5. *Ostoja-Starzewski M.* Towards thermoelasticity of fractal media // J. Thermal Stresses. 2007. V. 30, N 9–10. P. 889–896; DOI: 10.1080/01495730701495618.
6. *Cowin S. C.* Bone poroelasticity // J. Biomechanics. 1999. V. 32, N 3. P. 217–238.
7. *Hamm S., Bidaux P.* Dual-porosity fractal models for transient flow analysis in fissured rocks // Water Resources Research. 1996. V. 32, N 4. P. 959–970.

8. *Ghosh S., Lee K., Moorthy S.* A multi-level computational model for multi-scale damage analysis in composite and porous materials // Internat. J. Solids and Structures. 2001. V. 38, N 14. P. 2335–2385.
9. *Ghosh S.* Numerical homogenization of n-component composites including stochastic interface defects // Internat. J. Numerical Methods in Engineering. 1995. V. 38, N 6. P. 1087–1121.
10. *Li X., Korayem A.H., Li C., Liu Y., He H., Sanjayan J.G.* Incorporation of graphene oxide and silica fume into cement paste: A study of dispersion and compressive strength // Construction and Building Materials. 2016. V. 123. P. 332–342.
11. *Fu S. Y., Lauke B., Mader E.* Hybrid composites with metal and ceramic fillers: microstructure and mechanical properties // Composites Science and Technology. 2008. V. 68, N 7—8. P. 1831–1838.
12. *Fratzl P., Burgert I.* Bioinspired materials research: What can we really learn from nature's structural materials? // J. Royal Society Interface. 2007. V. 4, N 15. P. 637–642.
13. *Мишин А.В.* Учёт обобщённой производной и коллективного влияния фаз на процесс гомогенизации // Сиб. журн. индустр. математики. 2022. Т. 25, № 4. С. 86–98.
14. *Khoroshun L.P.* Mathematical models and methods of the mechanics of stochastic composites // Appl. Mechanics. 2000. V. 30, N 10. P. 30–62.
15. *Khoroshun L.P.* A new mathematical model of the nonuniform deformation of composites // Mekh. Compos. Mater. 1995. V. 31, N 3. P. 310–318.
16. *Шермергор Т.Д.* Теория упругости микронеоднородных сред. М.: Наука, 1977.
17. *Christensen R.M.* Theory of Viscoelasticity. An Introduction. N. Y.: Academic Press, 1982.
18. *Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П.* Осреднение процессов в периодических средах. М.: Наука, 1984.
19. *Hashin Z., Shtrikman S.* On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity // J. Mech. Phys. Solids. 1962. V. 10, N 4. P. 335–342.
20. *Bruggeman D.A.G.* Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. II. Dielektrizitatskonstanten und Leitfahigkeiten von Vielrkistallen der nichtregularen Systeme // Ann. Phys. 1936. Bd. 417, N 25. P. 645–672.
21. *Hill R.A.* Self-consistent mechanics of composite materials // J. Mech. Phys. Solids. 1965. V. 13, N 4. P. 213–222.
22. *Эшелби Дж.* Континуальная теория дислокаций. М.: Изд-во иностр. лит., 1963.
23. *Болотин В.В., Москаленко В. Н.* Определение упругих констант микронеоднородной среды // Журн. Прикл. Мех. Техн. Физ. 1968. Т. 34, № 1. С. 66–72.
24. *Нигматуллин Р.И.* Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978.
25. *Жидков В.В., Козлов С.М., Олейник О.А.* Усреднение дифференциальных операторов. М.: Физматлит, 1993.
26. *Piatnitski A.L., Chechkin G.A., Shamaev A.S.* Homogenization: Methods and Applications. AMS, 2007.
27. *Ponte Castaneda P., Willis J.R.* The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media // J. Mech Phys Solids. 1995. V. 43. P. 1919–1951.
28. *Mori T., Tanaka K.* Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions // Acta Metall. 1973. V. 21. P. 571–574.
29. *Fedotov A.* The hybrid homogenization model of elastic anisotropic porous materials // J. Mater. Sci. 2018. V. 53. P. 5092–5102.
30. *Шварц Л.* Математические методы для физических наук. М.: Мир, 1965.
31. *Мишин А.В.* Обобщённая производная и её использование для анализа микроструктуры гетерогенной среды // Сиб. журн. индустр. математики. 2021. Т. 24, № 4. С. 79–96; DOI: 10.33048/SIBJIM.2021.24.406
32. *Боголюбов А.Н., Левашова Н.Т., Могилевский И.Е., Мухартова Ю.В., Шапкина Н.Е.* Функция Грина оператора Лапласа. Москва: изд-во МГУ, 2018.
33. *Khoroshun L.P.* Random functions theory in problems on the macroscopic characteristics of microinhomogeneous media // Appl. Mechanics. 1978. V. 14. P. 3–17.

SIBERIAN JOURNAL OF INDUSTRIAL MATHEMATICS

UDC 539.3

DERIVATION OF THE EFFECTIVE TRANSPORT COEFFICIENT FOR HETEROGENEOUS MEDIA WITH HIERARCHICAL STRUCTURE USING THE FORMALISM OF GENERALIZED DERIVATIVES

© 2026 A. V. Mishin[1,2]

[1]*Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS, Institutskaya str., 4/1, Novosibirsk 630090, Russia*
[2]*Novosibirsk State University, Pirogova str., 1, Novosibirsk 630090, Russia*

E-mail: mishinav@itam.nsc.ru

Received 13.03.2026, revised 22.06.2026, accepted 16.09.2026

Abstract. This paper presents operations for homogenizing a stationary heat conduction equation with a Fourier-type equation of state. The heterogeneous medium is two-phase and has a hierarchical structure (a heterogeneous medium nested within a heterogeneous medium). The method of conditional moments and the generalized derivative formalism taking into account the configuration of the internal boundaries of the heterogeneous system are used. To account for the multilevel structure, homogenization is performed for a bounded inhomogeneous medium. The effective coefficient is obtained for a three-dimensional space and then generalized to a space of arbitrary dimension. The mechanism for the appearance of characteristic phase sizes in the effective coefficient is analyzed, resulting from the use of the generalized derivative formalism and homogenization for a bounded system. The operations performed demonstrate the presence of an effective number of degrees of freedom for the analyzed field in a heterogeneous medium. The influence of conditions at interphase boundaries on the resulting effective coefficient is considered.

Keywords: heterogeneous medium, microstructure, generalized derivative, Green's function, conditional averaging, correlation function, Fourier transform.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.307

REFERENCES

1. Li C., Thostenson E.T., Chou T.-W. Modeling and characterization of the electrical conductivity of carbon nanotube-based polymer composites. *Polymer*, 2011, Vol. 52, No. 13, pp. 2964–2973.
2. Sahimi M. Flow phenomena in rocks: From continuum models to fractals, percolation, cellular automata, and simulated annealing. *Reviews of Modern Physics*, 1993, Vol. 65, No. 4, pp. 1393–1534.
3. Savatorova V.L., Talonov A.V., Vlasov A.N., Volkov-Bogorodsky D.B. Multiscale modeling of thermoelastic properties of composites with periodic structure of heterogeneities. *Materials Physics and Mechanics*, 2012, Vol. 13, pp. 130–142.
4. Rutqvist J., Wu Y.-S., Tsang C.-F., Bodvarsson G. A numerical model for thermo-hydro-mechanical coupling in fractured rock. *Internat. J. Rock Mechanics Mining Sci.*, 2002, Vol. 39, No. 4, pp. 429–442.
5. Ostoja-Starzewski M. Towards thermoelasticity of fractal media. *J. Thermal Stresses*, 2007, Vol. 30, No. 9–10, pp. 889–896; DOI: 10.1080/01495730701495618.
6. Cowin S. C. Bone poroelasticity. *J. Biomechanics*, 1999, Vol. 32, No. 3, pp. 217–238.
7. Hamm S., Bidaux P. Dual-porosity fractal models for transient flow analysis in fissured rocks. *Water Resources Research*, 1996, Vol. 32, No. 4, pp. 959–970.

English translation is published in Journal of Applied and Industrial Mathematics, 2026, Vol. 20, No. 3.

8. Ghosh S., Lee K., Moorthy S. A multi-level computational model for multi-scale damage analysis in composite and porous materials. *Internat. J. Solids and Structures*, 2001, Vol. 38, No. 14, pp. 2335–2385.
9. Ghosh S. Numerical homogenization of n-component composites including stochastic interface defects. *Internat. J. Numerical Methods in Engineering*, 1995, Vol. 38, No. 6, pp. 1087–1121.
10. Li X., Korayem A.H., Li C., Liu Y., He H., Sanjayan J.G. Incorporation of graphene oxide and silica fume into cement paste: A study of dispersion and compressive strength. *Construction and Building Materials*, 2016, Vol. 123, pp. 332–342.
11. Fu S. Y., Lauke B., Mader E. Hybrid composites with metal and ceramic fillers: microstructure and mechanical properties. *Composites Science and Technology*, 2008, Vol. 68, No. 7—8, pp. 1831–1838.
12. Fratzl P., Burgert I. Bioinspired materials research: what can we really learn from nature's structural materials? *J. Royal Society Interface*, 2007, Vol. 4, No. 15, pp. 637–642.
13. Mishin A.V. Uchyot obobshchyonnoj proizvodnoj i kollektivnogo vliyaniya faz na process gomogenizacii [Accounting for the generalized derivative and the collective influence of phases on the homogenization process]. *Sib. Zhurn. Indust. Mat.*, 2022, Vol. 25, No. 4, pp. 86–98 (in Russian).
14. Khoroshun L.P. Mathematical models and methods of the mechanics of stochastic composites. *Appl. Mechanics*, 2000, Vol. 30, No. 10, pp. 30–62.
15. Khoroshun L.P. A new mathematical model of the nonuniform deformation of composites. *Mekh. Compos. Mater.*, 1995, Vol. 31, No. 3, pp. 310–318.
16. Shermergor T. D. Elasticity theory for microinhomogeneous Materials. Moscow: Nauka, 1977 (in Russian).
17. Christensen R.M. Theory of Viscoelasticity. An Introduction. N. Y.: Academic Press, 1982.
18. Bahvalov N.S., Panasenko G.P. Osrednenie processov v periodicheskih sredah [Averaging of processes in periodic media]. Moscow: Nauka, 1984 (in Russian).
19. Hashin Z., Shtrikman S. On some variational principles in anisotropic and nonhomogeneous elasticity. *J. Mech. Phys. Solids*, 1962, Vol. 10, No. 4, pp. 335–342.
20. Bruggeman D.A.G. Berechnung verschiedener physikalischer Konstanten von heterogenen Substanzen. II. Dielektrizitatskonstanten und Leitfahigkeiten von Vielrkistallen der nichtregularen Systeme. *Ann. Phys.*, 1936, Bd. 417, No. 25, pp. 645–672.
21. Hill R.A. Self-consistent mechanics of composite materials. *J. Mech. Phys. Solids*, 1965, Vol. 13, No. 4, pp. 213–222.
22. Ashby J. Continuum Theory of Dislocations. Moscow: Foreign Literature Publ., 1963 (in Russian).
23. Bolotin V.V., Moskalenko V. N. Determination of the elastic constants of a micro inhomogeneous medium. *Zh. Prikl. Mekh. Tekhn. Fiz.*, 1968, Vol. 34, No. 1, pp. 66–72 (in Russian).
24. Nigmatullin R.I. Osnovy mehaniki geterogennyh sred [Fundamentals of the mechanics of heterogeneous media]. Moscow: Nauka, 1978 (in Russian).
25. Zhikov V.V., Kozlov S.M., Oleinik O.A. Usrednenie differencial'nyh operatorov [Homogenization of differential operators]. Moscow: Fizmatlit, 1993 (In Russian).
26. Piatnitski A.L., Chechkin G.A., Shamaev A.S. Homogenization: Methods and Applications. AMS, 2007.
27. Ponte Castaneda P., Willis J.R. The effect of spatial distribution on the effective behavior of composite materials and cracked media. *J. Mech Phys Solids*, 1995, Vol. 43, pp. 1919–1951.
28. Mori T., Tanaka K. Average stress in matrix and average elastic energy of materials with misfitting inclusions. *Acta Metall*, 1973, Vol. 21, pp. 571–574.
29. Fedotov A. The hybrid homogenization model of elastic anisotropic porous materials. *J. Mater. Sci.*, 2018, Vol. 53, pp. 5092–5102.
30. Shvarc L. Matematicheskie metody dlya fizicheskih nauk [Mathematical methods for the physical sciences]. M.: Mir, 1965 (in Russian).
31. Mishin A.V. Obobshchyonnaya proizvodnaya i eyo ispol'zovanie dlya analiza mikrostruktury geterogennoj sredy [Generalized derivative and its use for analyzing the microstructure of a heterogeneous medium]. *Sib. Zhurn. Indust. Mat.*, 2021, Vol. 24, No. 4, pp. 79–96 (in Russian);
DOI: 10.33048/SIBJIM.2021.24.406

32. Bogolyubov A.N., Levashova N.T., Mogilevskij I.E., Muhartova Yu.V., Shapkina N.E. Funkciya Grina operatora Laplasa [Green's function of the Laplace operator]. Moskva: MGU Publ., 2018 (in Russian).
33. Khoroshun L.P. Random functions theory in problems on the macroscopic characteristics of microinhomogeneous media. *Appl. Mechanics*, 1978, Vol. 14, pp. 3–17.

УДК 621.45:034.3

ЧИСЛЕННАЯ ТРЁХМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ПОЛНОГО ЦИКЛА ПРОЦЕССА ПЕЧНОГО ПРОИЗВОДСТВА ТЕХНИЧЕСКОГО УГЛЕРОДА

© 2026 А. П. Почуев[1], С. Г. Черный[2a]

[1] *Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, 2, г. Новосибирск 630090, Россия,*
[2] *Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, просп. Акад. Лаврентьева, 1, г. Новосибирск 630090, Россия*

E-mail: sgcherny2023@yandex.ru

Поступила в редакцию 08.09.2025 г.; после доработки 03.12.2025 г.; принята к публикации 13.05.2026 г.

Настоящая работа посвящена разработке и анализу обобщённой численной модели процесса образования технического углерода (ТУ) в промышленных печных реакторах. Актуальность исследования обусловлена необходимостью повышения качества продукции, снижения производственных затрат и оптимизации технологических процессов на предприятиях, таких как ООО «ОмскТехУглерод». Модель базируется на фундаментальных уравнениях гидродинамики (RANS) и включает современные подходы к описанию ключевых физико-химических явлений. Для учёта сложных вихревых и анизотропных течений используется модель напряжений Рейнольдса (RSM). Турбулентное горение описывается с помощью PDF-модели фракции смеси (Non-Premixed Combustion), а кинетика сажеобразования (нуклеация, рост и окисление частиц) моделируется на основе двухстадийной модели Теснера с модификациями Магнуссена и Хертагера. Численное моделирование было проведено в программном комплексе ANSYS Fluent для двух различных конфигураций реакторов: 1) с предкамерой сжигания топлива и интенсивным перемешиванием; 2) с осевым сплошным потоком теплоносителя и радиальным впрыском сырья. В результате получены и проанализированы поля распределения ключевых параметров: температуры, концентраций компонентов, концентрации зародышей сажи и её массовой доли. Результаты показали, что разработанная модель адекватно воспроизводит основные стадии процесса: генерацию высокотемпературного теплоносителя, пиролиз сырья, образование зародышей в зонах с оптимальными температурами, последующий рост частиц и их частичное окисление. Сравнение конфигураций выявило влияние гидродинамики на локализацию зон сажеобразования, подтвердив при этом общность фундаментальных стадий процесса. Разработанная численная модель представляет собой ценный инструмент для качественного анализа сложных взаимосвязанных процессов в реакторах ТУ и закладывает основу для дальнейшей верификации, калибровки и оптимизации промышленных установок.

Ключевые слова: Carbon Black, Ansys Fluent, CFD, Tesner soot model, mixture fraction model.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.308

ВВЕДЕНИЕ

Печной синтез технического углерода представляет собой высокотемпературный термохимический процесс глубокой переработки углеводородного сырья в проточном тракте. В рабочем объеме аппарата одновременно протекает совокупность взаимосвязанных явлений: турбулентное смешение высокоскоростных струй, окисление топлива, пиролиз углеводородных компонентов, а также фазовый переход с зарождением и последующим гетерогенным ростом

твердых дисперсных частиц. Протекание данных стадий в условиях короткого времени пребывания смеси и локальных температур свыше 1400–1900 K делает контактные экспериментальные измерения внутри реакционной зоны затруднительными.

В этой связи методы вычислительной гидродинамики (CFD) становятся инструментом исследования локальной структуры потока и распределения химических компонентов. Традиционные расчетные схемы, не способны описать влияние геометрии проточной части и способов ввода реагентов на формирование конечного продукта. Пространственная неравномерность смешения сырьевых струй с высокотемпературным теплоносителем определяет положение зон максимальной скорости нуклеации и интенсивность окисления сажи. Построение адекватной трехмерной модели требует совместного решения задач турбулентного переноса в условиях выраженной анизотропии, горения предварительно неперемешанных сред и кинетики сажеобразования.

Целью настоящей работы является формулировка и реализация трехмерной численной модели полного цикла печного процесса синтеза углерода, сочетающей модель напряжений Рейнольдса (RSM) для описания сложных вихревых течений, вероятностный подход к диффузионному горению на базе фракции смеси (PDF) и двухстадийную кинетическую модель нуклеации и роста дисперсной фазы. В рамках исследования проводится сравнительный анализ гидродинамической структуры и распределения термохимических полей в двух конструктивных компоновках реакторного узла: с закрученной предкамерой сгорания и с непрерывной осевой подачей теплоносителя при радиальном дискретном впрыске сырья.

1. ТЕХНИЧЕСКИЙ УГЛЕРОД: ОСНОВНАЯ ИНФОРМАЦИЯ И МЕТОДЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

1.1. Описание, свойства, получение и применение

Технический углерод (ТУ), часто называемый также сажей в более широком смысле, представляет собой высокодисперсный углеродный материал, получаемый в строго контролируемых промышленных условиях. Принципиальное отличие технического углерода от сажи, образующейся как побочный продукт неконтролируемого горения, заключается именно в целенаправленном производстве ТУ для получения продукта с заданными физико-химическими свойствами, отвечающими конкретным стандартам и ожиданиям потребителей. Основным компонентом технического углерода является углерод, содержание которого составляет не менее 90% [1].

На микроскопическом уровне технический углерод обладает сложной структурой. Его элементами являются плоские графитоподобные решётки, состоящие из шестичленных углеродных циклов [2]. Несколько таких решёток (обычно от 3 до 7), расположенных не строго одна над другой, а со смещением, образуют так называемый элементарный кристаллит [2]. Первичная частица технического углерода формируется из беспорядочно, но компактно расположенных элементарных кристаллитов. В процессе роста частиц происходит их столкновение и сращивание, приводящее к образованию прочных агрегатов, также называемых первичными структурными единицами. Размер и форма этих агрегатов определяют структурные свойства технического углерода. Первичные агрегаты могут далее объединяться в более крупные, но менее прочные вторичные структуры (цепочки), связанные межмолекулярными силами (от слабых Ван-дер-Ваальсовых до относительно сильных водородных связей).

Важнейшими физико-химическими свойствами технического углерода, определяющими его потребительские качества, являются следующие свойства.

Степень дисперсности: характеризуется средним размером первичных частиц, удельной поверхностью и удельным числом частиц в единице массы. Чем меньше размер частиц,

тем выше дисперсность и больше удельная поверхность. Это свойство напрямую влияет, например, на усиливающий эффект ТУ в резинах, так как от размера удельной поверхности зависит величина адсорбционных сил, связывающих ТУ с каучуком.

Структурность: определяется степенью разветвлённости и размером агрегатов частиц. Высокоструктурный ТУ характеризуется более развитыми и сложными агрегатами.

Химические свойства поверхности: Наличие на поверхности частиц различных функциональных групп (например, кислородсодержащих) влияет на взаимодействие ТУ с другими компонентами в композиционных материалах.

Существует несколько промышленных способов получения технического углерода, среди которых наиболее распространённым является печной процесс. В этом методе углеводородное сырьё (например, природный газ, жидкие нефтепродукты или каменноугольные масла) подвергается неполному сгоранию и/или термическому разложению в специальных реакторах при высоких температурах, обычно в диапазоне 1100–1900° С. Высокая температура достигается за счёт сжигания топлива (часто природного газа) в камере сгорания реактора. Полученный реакционный газ, содержащий частицы технического углерода, затем охлаждается (в том числе водой), и ТУ выделяется из потока, после чего гранулируется.

Другие методы получения включают ламповый, термический и канальный процессы, каждый из которых позволяет получать ТУ с различными характеристиками.

Благодаря своим уникальным свойствам технический углерод находит широкое применение в различных отраслях промышленности.

Резинотехническая промышленность: является основной областью применения ТУ, где он используется в качестве усиливающего наполнителя для каучуков, значительно улучшая их прочность, износостойкость, эластичность и другие эксплуатационные характеристики. Различные марки ТУ применяются в производстве шин, резиновых уплотнений, конвейерных лент и других изделий.

Производство пластмасс: используется для придания пластмассам электропроводности, защиты от ультрафиолетового излучения, а также в качестве чёрного пигмента.

Лакокрасочная промышленность: применяется как чёрный пигмент в красках, эмалях и покрытиях.

Полиграфическая промышленность: используется в производстве печатных красок.

Другие области: находит применение в производстве электродов, сорбентов, катализаторов и других материалов.

Исследования в области технического углерода продолжаются, направленные на улучшение его свойств, разработку новых марок и оптимизацию процессов его получения. Как уже упоминалось, работы П. А. Теснера [3, 4] и модель Брукса — Мосса [5–8] являются фундаментальными для понимания кинетики и механизмов образования ТУ. Современные исследования активно используют методы вычислительной гидродинамики (CFD) для детального моделирования процессов в реакторах технического углерода, что позволяет глубже понять взаимосвязь между технологическими параметрами и свойствами конечного продукта.

1.2. Разработанность

Разработка моделей образования сажи, которые могут быть адаптированы для описания процессов получения технического углерода, имеет длительную историю и прошла несколько этапов усложнения и детализации. Понимание этих моделей критически важно для оптимизации промышленных процессов и улучшения качества целевого продукта.

Первоначально понимание механизмов сажеобразования носило в основном качественный характер. Исследователи, такие как Палмер и Куллис [9], Хайнс и Вагнер [10], а также Глазман [11], заложили основу для понимания сложных путей превращения углеводородов в твёрдые частицы сажи. Грубо говоря, этот процесс описывался как образование ароматических

углеводородов из неароматического топлива в газовой среде с последующим усложнением их структуры путём присоединения алкильных групп и «конденсацией» до частиц сажи.

Значительным шагом вперёд стала двухступенчатая модель, предложенная П. А. Теснером в 1971 году [3, 4, 12]. Эта модель разделяет процесс образования сажи на два ключевых этапа.

1. Образование активных радикалов (зародышей): на этой стадии из молекул исходного углеводородного сырья (в первоначальной модели Теснера это часто ацетилен) в результате высокотемпературных реакций образуются активные центры или радикалы, которые служат первичными зародышами для будущих частиц сажи. Этот процесс часто описывается как разветвлённо-цепной. Скорость образования зародышей $\frac{dN}{dt}$ (где N — концентрация зародышей) зависит от концентрации исходного углеводорода и температуры.

2. Рост частиц сажи: Образовавшиеся зародыши начинают расти за счёт гетерогенного присоединения углерода из газовой фазы (например, молекул ацетилена или других углеводородных фрагментов) к их поверхности. Скорость роста частиц $\frac{dm}{dt}$ (где m — масса сажи) зависит от концентрации зародышей, концентрации углеводородов, доступных для роста, и температуры.

Константы скоростей для этих процессов в модели Теснера обычно определяются экспериментально. Важной особенностью модели является учёт того, что образование новых зародышей может тормозиться уже существующими частицами сажи, которые конкурируют за активные молекулы углеводородов [13].

В 1977 году Магнуссен и Хертагер расширили модель Теснера, применив «модель диссипации вихря» («Eddy Dissipation Model» – EDM) для учёта влияния турбулентности на процессы горения и сажеобразования [3]. Эта модификация стала важной, поскольку промышленные процессы получения технического углерода, как правило, протекают в условиях интенсивного турбулентного перемешивания. Подход Теснера — Магнуссена часто считается оптимальным с точки зрения баланса между детализацией процессов и сложностью реализации в численных моделях. В рамках этого подхода скорость химических реакций, включая реакции, ведущие к образованию и выгоранию сажи, лимитируется не только кинетикой самих химических превращений, но и скоростью турбулентного смешения реагентов. Это особенно актуально для диффузионных пламен, где топливо и окислитель подаются раздельно. Модель Магнуссена и Хертагера связывает скорость реакции со скоростью диссипации турбулентных вихрей, которая характеризует интенсивность перемешивания на микроуровне.

Несмотря на широкое применение моделей типа Теснера — Магнуссена, научное сообщество продолжало работать над более глубоким пониманием и детализацией процессов сажеобразования.

Модели, основанные на двух транспортных уравнениях: развитие получили модели, описывающие эволюцию не только общей массы сажи, но и концентрации сажевых частиц. Примером является модель Брукса и Мосса (1999) [5–8], которая учитывает нуклеацию, рост частиц за счёт присоединения элементарных частиц (часто ацетилена), коагуляцию (слипание мелких частиц в более крупные) и окисление. Этот подход позволяет получить информацию о распределении частиц по размерам, что крайне важно для прогнозирования свойств технического углерода.

Детальные кинетические механизмы: с развитием вычислительных мощностей стали появляться модели, основанные на детальном описании химической кинетики пиролиза и окисления углеводородов, включая образование полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) как предшественников сажи [14]. Эти механизмы могут включать сотни химических компонентов и тысячи элементарных реакций. Хотя такие модели обеспечивают наиболее

полное описание химических превращений, их сложность и вычислительная стоимость ограничивают применение в инженерных расчётах крупномасштабных промышленных установок. Проблема адекватного описания перехода от газофазных молекул ПАУ к образованию зародышей и росту частиц конденсированной фазы остаётся одной из ключевых в этих моделях.

Марковские процессы и уравнения Колмогорова: для описания цепочки превращений углеводородного топлива и образования различных фракций сажи предлагались подходы, основанные на моделировании этих процессов как марковских процессов с конечным числом состояний, описываемых системами обыкновенных дифференциальных уравнений Колмогорова [15, 16].

Несмотря на значительный прогресс, полное понимание механизмов образования сажи, особенно критического перехода от молекул к первичным наночастицам, всё ещё не достигнуто. Современные исследования активно используют как экспериментальные методы, так и передовые вычислительные подходы, включая классическую молекулярную динамику, для изучения атомистической структуры сажи и механизмов её образования и распада. Для практических задач моделирования производства технического углерода, где важен баланс между точностью и вычислительными затратами, полуэмпирические модели, подобные модели Теснера с модификациями Магнуссена и Хертагера или модели Брукс — Мосса, продолжают оставаться востребованными. Они позволяют учесть основные физико-химические процессы и влияние условий в реакторе на выход и свойства продукта, что делает их ценным инструментом для инженеров и исследователей. Важно отметить, что при адаптации этих моделей к конкретным условиям производства технического углерода необходимо учитывать специфику используемого сырья и конструкцию реактора.

1.3. Актуальность

Актуальность исследований в области моделирования производства технического углерода (ТУ) в настоящее время чрезвычайно высока и обусловлена комплексом экономических, технологических и экологических факторов. Несмотря на длительную историю изучения процессов сажеобразования и промышленного производства ТУ, потребность в более глубоком понимании и точном количественном описании этих сложных явлений не только не снижается, а, наоборот, возрастает.

Технический углерод остаётся незаменимым компонентом во многих отраслях, в первую очередь в производстве шин и резинотехнических изделий, где он выполняет функцию усиливающего наполнителя, а также в производстве пластмасс, красок и покрытий. Промышленные предприятия, такие как ООО «ОмскТехУглерод», напрямую заинтересованы в разработке и внедрении достоверных математических моделей процесса производства ТУ. Это связано со следующими целями.

Повышение качества продукции: моделирование позволяет глубже понять, как параметры процесса (температура, состав сырья, гидродинамика потоков в реакторе, время пребывания) влияют на ключевые характеристики ТУ, такие как дисперсность, структурность, удельная поверхность и химический состав поверхности частиц. Точное прогнозирование этих свойств необходимо для производства ТУ, полностью соответствующего требованиям конкретных потребителей.

Снижение производственных затрат: оптимизация технологических режимов на основе моделей может привести к снижению энергопотребления (например, за счёт более эффективного использования тепла от сжигания топлива), уменьшению расхода сырья и увеличению выхода целевого продукта.

Повышение стабильности и надёжности процесса: модели могут помочь выявить критические параметры, влияющие на стабильность работы реактора, и разработать стратегии для предотвращения нежелательных явлений, таких как образование отложений (кокса) или выход параметров процесса за допустимые пределы.

Процесс образования технического углерода в печи включает в себя множество взаимосвязанных и конкурирующих физико-химических явлений: турбулентное течение многокомпонентной газовой смеси, распыление и испарение жидкого сырья, горение топлива, пиролиз углеводородного сырья, нуклеацию (образование первичных зародышей сажи), рост частиц за счёт поверхностных реакций и присоединения газофазных предшественников (таких как ацетилен и ПАУ), коагуляцию частиц (слипание), агломерацию и окисление (выгорание) сажи. Математическое описание такой сложной системы требует применения современных подходов вычислительной гидродинамики (CFD) и детальных моделей химической кинетики. Разработка и верификация таких комплексных моделей является актуальной научной задачей.

Производство технического углерода, как и любой высокотемпературный процесс, связанный с переработкой углеводородного сырья, потенциально может оказывать воздействие на окружающую среду. Актуальность моделирования здесь проявляется в возможности проведения операций.

Прогнозирования и минимизации выбросов вредных веществ: модели могут помочь оценить образование побочных продуктов, таких как оксиды углерода, оксиды азота, полициклические ароматические углеводороды (ПАУ), и разработать технологические решения для снижения их выбросов.

Повышения эффективности утилизации отходящих газов: оптимизация процессов может способствовать более полному использованию энергетического потенциала отходящих газов.

Помимо традиционных областей применения, технический углерод всё чаще рассматривается как перспективный материал для новых высокотехнологичных приложений, например, в производстве электропроводящих композитов, компонентов литий-ионных аккумуляторов, суперконденсаторов, катализаторов и сорбентов. Для направленного синтеза ТУ с заданными уникальными свойствами (например, с определённой пористостью, электропроводностью, морфологией частиц) необходимы предиктивные модели, связывающие условия синтеза со структурой и свойствами продукта.

Несмотря на значительный прогресс, некоторые фундаментальные аспекты образования сажи, особенно механизм нуклеации и ранние стадии роста частиц, до сих пор остаются предметом научных дискуссий. Моделирование, в сочетании с современными экспериментальными методами, играет ключевую роль в проверке гипотез и углублении фундаментальных знаний в этой области. Актуальность заключается в необходимости создания моделей, которые не только корректно описывают макроскопические параметры процесса, но и основаны на глубоком понимании микроскопических механизмов. В условиях глобального рынка и растущей конкуренции, внедрение передовых методов моделирования и оптимизации является важным фактором повышения конкурентоспособности предприятий-производителей технического углерода. Способность быстро адаптироваться к изменяющимся требованиям рынка, разрабатывать новые марки продукции и повышать эффективность производства напрямую зависит от уровня научно-технического развития, неотъемлемой частью которого является математическое моделирование.

Таким образом, актуальность исследований в области моделирования производства технического углерода определяется насущными потребностями промышленности в повышении эффективности и качества, сложностью самого процесса, требующего применения современных научных методов, возрастающими экологическими требованиями, а также перспективами создания новых материалов и технологий. Работа, направленная на адаптацию и применение моделей для прогнозирования полного цикла производства ТУ, находится в русле этих актуальных научных и инженерных задач.

1.4. Связка процессов образования сажи и процессов сгорания в потоке газа теплоносителя

Процесс образования технического углерода в промышленных печах неразрывно связан с высокотемпературными процессами горения, которые обеспечивают необходимый температурный режим и создают химическую среду для пиролиза и последующих превращений углеводородного сырья. Поэтому любая адекватная модель образования ТУ должна учитывать эту связь. Существуют различные подходы к моделированию этой связки, отличающиеся степенью детализации и вычислительной сложностью.

1.4.1. Однофазовое моделирование с PDF моделью фракции смеси (Unpremixed Combustion).

Этот подход рассматривает реагирующую систему как единую газовую фазу, в которой происходят процессы горения и сажеобразования. Ключевым элементом для моделирования горения в таком подходе часто выступает модель функции плотности вероятности (PDF) фракции смеси. Этот метод хорошо зарекомендовал себя для описания турбулентного диффузионного горения, которое характерно для многих промышленных печей, где топливо и окислитель подаются раздельно [17].

Суть PDF модели фракции смеси: вместо решения полного набора уравнений для всех химических компонентов, этот подход основывается на концепции фракции смеси (mixture fraction, f). Фракция смеси — это скалярная переменная, которая характеризует локальный состав смеси, изменяясь от 0 (чистый окислитель) до 1 (чистое топливо). Предполагается, что все термохимические свойства (температура, плотность, концентрации основных продуктов горения) являются уникальными функциями от фракции смеси и степени протекания реакции (прогресс-переменной). Влияние турбулентности на горение учитывается через PDF для фракции смеси, которая описывает вероятностное распределение значений f в данной точке из-за турбулентных флуктуаций. Химические реакции часто предполагаются находящимися в равновесии или описываются с помощью таблиц предварительно рассчитанных состояний (flamelet-модели).

Интеграция модели сажеобразования: модель образования сажи (например, двухступенчатая модель Теснера [4, 12] с модификациями Магнуссена и Хертагера для учёта влияния турбулентности [3]) встраивается в эту газофазную модель. Уравнения для концентрации зародышей сажи и массовой концентрации сажи решаются параллельно с уравнениями течения и горения. Источниковые члены в этих уравнениях (скорости нуклеации, роста, коагуляции, окисления) зависят от локальных параметров газовой фазы (температуры, концентраций углеводородов-предшественников сажи, концентраций окислителей), которые, в свою очередь, определяются PDF моделью фракции смеси. Таким образом, модель горения предоставляет необходимые локальные условия для модели сажеобразования.

Преимущества однофазового подхода с PDF:

1. Относительная вычислительная эффективность: по сравнению с многофазными моделями, решение уравнений только для одной (газовой) фазы значительно снижает вычислительные затраты. Это особенно важно при моделировании промышленных установок большого масштаба.

2. Адекватное описание диффузионного горения: PDF модель фракции смеси хорошо справляется с описанием процессов смешения и горения в диффузионном пламени, которое являются типичным для печей технического углерода, где сырьё и горячие газы (продукты сгорания топлива) смешиваются в реакционной зоне.

3. Упрощённое задание граничных условий: граничные условия задаются для единой газовой фазы, что может быть проще, чем определение параметров для нескольких фаз на входе в расчётную область.

4. Меньшее количество эмпирических моделей: хотя сама модель сажеобразования содержит эмпирические константы, описание горения через PDF и равновесные или flamelet-таблицы может потребовать меньше настроечных параметров, чем детальное моделирование многофазных взаимодействий.

1.4.2. Многофазовое моделирование (дисперсионная модель).

Этот подход явным образом разделяет систему на несколько фаз, таких как непрерывную газовую фазу (газ-теплоноситель, продукты горения, пары сырья) и одну или несколько дисперсных фаз (капли жидкого сырья, твёрдые частицы сырья, частицы сажи). В статье [18] представлен пример такого подхода для газификации биомассы, где сажеобразование также играет важную роль.

Суть многофазного подхода: для газовой фазы решаются уравнения Навье-Стокса, энергии и переноса компонентов. Для дисперсных фаз могут использоваться эйлерово-эйлеровы (каждая фаза рассматривается как континуум) или эйлерово-лагранжевы (отслеживаются траектории отдельных частиц или "пакетов"частиц) подходы. В контексте производства ТУ из жидкого сырья, дисперсная фаза – это капли сырья, которые испаряются, а затем их пары пиролизуются с образованием сажи. В [18], посвящённой биомассе, подробно рассматривается пиролиз твёрдых частиц с выделением летучих компонентов, включая смолы, которые являются предшественниками сажи. Моделируется разделение биомассы на компоненты (целлюлоза, гемицеллюлоза, лигнин), каждый со своей кинетикой пиролиза. Частицы сажи, образовавшиеся из газовой фазы (паров сырья или смол), также могут рассматриваться как отдельная дисперсная фаза или, как, в их транспорт может описываться в рамках континуального подхода уравнениями конвекции-диффузии-реакции, аналогично газовым компонентам, если частицы достаточно малы и их инерцией можно пренебречь. В работе [18] используется модель из двух уравнений для описания эволюции массовой доли сажи и числовой плотности числа частиц сажи.

Связь с процессом сгорания и сажеобразованием: горение топлива (для создания газа-теплоносителя) моделируется в газовой фазе. Тепло от горения передаётся каплям сырья, вызывая их испарение. Пары сырья затем смешиваются с горячими газами и пиролизуются. Модели сажеобразования (например, учитывающие нуклеацию из газофазных предшественников, рост, коагуляцию и окисление) активируются в тех областях, где условия (температура, концентрация предшественников) становятся подходящими. Происходит тепло- и массообмен между фазами.

Недостатки многофазного подхода (в сравнении с однофазным для некоторых задач):

1. Высокая вычислительная сложность: решение уравнений для нескольких фаз и учёт межфазного взаимодействия требует значительно больших вычислительных ресурсов.

2. Необходимость детальных подмоделей: требуется большее количество подмоделей для описания поведения дисперсной фазы (например, дробление капель, испарение, кинетика пиролиза частиц, взаимодействие частиц со стенками), каждая из которых вносит свои неопределённости и требует калибровки.

3. Сложность верификации: Экспериментальная верификация моделей межфазного взаимодействия и поведения дисперсной фазы в условиях промышленных реакторов затруднена.

Подводя итог, выбор между однофазовым и многофазным подходом для моделирования образования технического углерода зависит от конкретных целей исследования, доступных вычислительных ресурсов и необходимой степени детализации. Однофазовый подход с PDF моделью фракции смеси предлагает хорошее сочетание относительной простоты и способности адекватно описывать ключевые процессы диффузионного горения и связанного с ним сажеобразования. Его преимущества в меньшей вычислительной сложности и более простом задании начальных и граничных условий делают его привлекательным для инженерных расчётов

и оптимизации промышленных реакторов ТУ, особенно когда основное внимание уделяется глобальным параметрам процесса и свойствам сажи в газовой фазе. Многофазный подход позволяет более детально рассмотреть поведение сырья (особенно если оно подаётся в виде капель или твёрдых частиц), процессы его испарения/пиролиза и взаимодействие с газовой средой. Однако это достигается ценой значительного усложнения модели и увеличения вычислительных затрат, как это видно из работы. Такой подход может быть более оправдан, когда критически важно детальное понимание начальных стадий превращения сырья или когда межфазные взаимодействия играют доминирующую роль.

1.5. Проблематика исследования

Моделирование процесса образования технического углерода (ТУ) в промышленных печах является сложной междисциплинарной задачей, имеющей высокую практическую значимость для оптимизации производства и улучшения качества продукции. Одно из предыдущих исследований было посвящено исследованию полуэмпирической модели мгновенного образования технического углерода по Бруксу-Моссу в гипотетическом реакторе с известными массовыми расходами на входе. Эта модель, описываемая системой двух обыкновенных дифференциальных уравнений для концентрации частиц и их массы, с коэффициентами, зависящими от плотности газовой смеси, массовых долей ацетилена, гидроксильных радикалов, кислорода и температуры, позволила получить первоначальное представление о кинетике образования ТУ. Однако, как было отмечено, такая система не была связана напрямую ни с химией протекающих процессов горения и пиролиза в реакторе, ни с физическими процессами переноса тепла и массы, то есть с гидродинамикой потоков внутри реакторного пространства. Это ограничение указывает на необходимость разработки более комплексной и обобщённой модели, способной учитывать эти взаимосвязи для более точного и надёжного прогнозирования процесса.

Объектом исследования является печной процесс образования технического углерода, протекающий в промышленных цилиндрических проточных реакторах, где жидкое углеводородное сырьё впрыскивается в поток горячих газов, образующихся при сжигании топлива. Предметом исследования выступают физико-химические процессы, лежащие в основе образования технического углерода в печном реакторе, и их численное моделирование. Это включает в себя изучение гидродинамики многокомпонентной реагирующей смеси, процессов горения топлива, термического разложения углеводородного сырья, а также кинетики образования и роста частиц технического углерода. Особое внимание уделяется применению и адаптации двухступенчатой модели Теснера-Магнуссена-Хертагера для описания сажеобразования и модели функции плотности вероятности (PDF) фракции смеси для моделирования турбулентного горения в рамках программного комплекса ANSYS Fluent.

Учитывая ограничения модели мгновенного образования, основной целью настоящей работы является разработка и анализ обобщённой численной модели процесса образования технического углерода в печных реакторах, основанной на гидродинамике несущей фазы и учитывающей ключевые физико-химические процессы, протекающие в реакторе, с использованием ресурсов системы ANSYS Fluent. Эта обобщённая модель должна обеспечить более надёжное и комплексное описание процесса по сравнению с упрощёнными подходами.

Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи.

— Осуществить переход от модели мгновенного образования к обобщённой модели, базирующейся на уравнениях гидродинамики несущей фазы (уравнения неразрывности, сохранения импульса и энергии), с описанием процесса сажеобразования с помощью двухступенчатой модели Теснера — Магнуссена — Хертагера и моделированием химии горения посредством PDF модели фракции смеси.

— Получить и проанализировать расчётные картины распределения ключевых параметров процесса (концентраций компонентов, температуры, концентрации зародышей и массовой

доли технического углерода) в реакторе с простой геометрией и заданными начальными и граничными условиями.

— Получить и проанализировать расчётные картины распределения параметров процесса в реакторе, моделирующем условия непрерывного потока с использованием условий симметрии для снижения вычислительных затрат и более детального изучения локальных характеристик течения и сажеобразования.

Решение этих задач позволит создать более совершенный инструмент для анализа и оптимизации промышленного производства технического углерода, способствуя лучшему пониманию сложных взаимосвязей между условиями в реакторе и свойствами конечного продукта.

1.6. Предыдущие исследования

В [20–21] предлагаются две численные модели процесса работы реактора. Обе модели описывают в трёхмерной постановке распыл и испарение жидкого углеводородного сырья в потоке газа-теплоносителя в реакторе и выполнены в приближении эйлерово-эйлерова подхода, реализованного на платформах ANSYS и FlowVision. В обоих вариантах движение несущей фазы (газ-теплоноситель и продукты испарения сырья) описывается системой уравнений Навье-Стокса, учитывающей турбулентность, массо- и теплоперенос. В ANSYS движение дисперсной фазы, так же, как и несущей описывается уравнениями Навье — Стокса. Для описания динамики дисперсной фазы во FlowVision применяются конвективно-диффузионные уравнения для концентрации частиц, импульса и энергии фазы. Непосредственно выход самого технического углерода из продуктов испарения сырья в этих работах не моделируется. Но оценки таких важнейших его физико-химических свойств, как степень дисперсности, характер вторичных структур (сажевых цепочек) и свойства поверхности сажевых частиц могут быть получены на стадии испарения распылённого сырья.

2. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ. ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ПРОЦЕССЫ

2.1. Уравнение неразрывности

Уравнение неразрывности, или уравнение сохранения массы, в дифференциальной форме записывается как:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}) = S_m, \tag{1}$$

где ρ — плотность среды (кг/м^3); t — время (с); $\mathbf{U}$ — вектор скорости потока (м/с); S_m — источниковый член (кг/(м^3·с)). В большинстве задач $S_m = 0$.

2.2. Уравнение сохранения импульса

Уравнение сохранения импульса для ньютоновской изотропной жидкости имеет вид:

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{U})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U}\mathbf{U}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_{ij}) + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F}, \tag{2}$$

где p — статическое давление (Па); $\boldsymbol{\tau}_{ij}$ — тензор вязких напряжений (Па):

$$\boldsymbol{\tau}_{ij} = \mu \left[(\nabla \mathbf{U} + (\nabla \mathbf{U})^T) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \mathbf{U}) \mathbf{I} \right], \tag{3}$$

где μ — динамическая вязкость, $\mathbf{I}$ — единичный тензор. $\rho \mathbf{g}$ — вектор объёмной силы тяжести (Н/м^3); $\mathbf{F}$ — вектор других внешних объёмных сил (Н/м^3).

2.3. Сохранение энергии

Уравнение сохранения энергии, записанное через полную энергию E, выглядит следующим образом:

$$\frac{\partial(\rho E)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}(\rho E + p)) = \nabla \cdot \left(k_{\text{eff}} \nabla T - \sum_j h_j \mathbf{J}_j + (\boldsymbol{\tau}_{\text{eff}} \cdot \mathbf{U}) \right) + S_h, \tag{4}$$

где E — полная энергия на единицу массы (Дж/кг), $E = h - p/\rho + U^2/2$; h — статическая энтальпия; k_{eff} — эффективная теплопроводность (Вт/(м·К)); $\mathbf{J}_j$ — вектор диффузионного потока j-го компонента смеси; $\boldsymbol{\tau}_{\text{eff}}$ — тензор эффективных напряжений; S_h — объёмный источниковый член тепла (Вт/м^3).

2.4. Модель напряжений Рейнольдса (RSM)

Для адекватного моделирования сложных турбулентных течений (сильно закрученные и рециркуляционные потоки), стандартные модели (как k-ε), могут быть неточными. В данной работе применяется модель напряжений Рейнольдса (RSM), которая напрямую вычисляет компоненты тензора напряжений Рейнольдса $\mathbf{R}_{ij} = \overline{u_i' u_j'}$. Общая форма транспортного уравнения для R_{ij}:

$$\frac{\partial R_{ij}}{\partial t} + C_{ij} = P_{ij} + \Phi_{ij} + D_{ij} - \varepsilon_{ij} + F_{ij}, \tag{5}$$

где C_{ij} — конвективный перенос; P_{ij} — член генерации напряжений; Φ_{ij} — тензор корреляции давления и градиента скорости; D_{ij} — диффузионный перенос; ε_{ij} — тензор скорости диссипации; F_{ij} — член генерации за счёт объёмных сил.

2.5. PDF – подход. Метод фракции смеси

Для моделирования турбулентного диффузионного горения используется метод фракции смеси (Non-Premixed Combustion Model). Подход основан на введении консервативной скалярной величины — фракции смеси (f):

$$f = \frac{\text{масса, пришедшая из потока топлива}}{\text{общая масса в точке}} \tag{6}$$

При допущении о «бесконечно быстрой химии», все термохимические свойства смеси становятся однозначными функциями от f. Вместо решения уравнений для всех компонентов, решается одно транспортное уравнение для осреднённой фракции смеси $\bar{f}$:

$$\frac{\partial(\rho \bar{f})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} \bar{f}) = \nabla \cdot \left(\left(\frac{\mu}{Sc} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla \bar{f} \right) + S_{m_f}. \tag{7}$$

Влияние турбулентных флуктуаций учитывается с помощью функции плотности вероятности (PDF), $P(f)$. Среднее значение скаляра $\bar{\phi}$ вычисляется как:

$$\bar{\phi} = \int_0^1 \phi(f) P(f; \bar{f}, \overline{f'^2})\, df. \tag{8}$$

Для построения PDF решается дополнительное транспортное уравнение для её дисперсии $g = \overline{f'^2}$.

2.5.1. Модель Теснера с модификациями Магнуссена и Хертагера.

Для описания кинетики сажеобразования применяется двухстадийная модель Теснера.

Образование зародышей (нуклеация): Скорость образования зародышей (N):

$$R_{N,f} = n_0 + (k_f - k_g)n_N - k_{t0}n_s n_N \tag{9}$$

Решается транспортное уравнение для числовой концентрации зародышей n_N:

$$\frac{\partial n_N}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}n_N) = \nabla \cdot \left(\left(\frac{\mu}{Sc_{N,t}} \right) \nabla n_N \right) + R_N \tag{10}$$

Рост и окисление сажи: Скорость роста массы сажи Y_s за счёт конденсации:

$$R_{s,f} = M_{\text{part}}(k_\alpha - k_\beta n_N)n_N \tag{11}$$

Скорость окисления сажи ($R_{s,c}$) лимитируется скоростью турбулентного смешения и описывается моделью Магнуссена и Хертагера (Eddy Dissipation Model):

$$R_{s,c} = A_M \rho \frac{\varepsilon}{k} \min \left(Y_s, \frac{Y_{\text{Ox}}}{S_{\text{Ox}}}, C_{M,R} \frac{Y_{\text{Fuel}}}{S_{\text{Fuel}}} \right) \tag{12}$$

Решается транспортное уравнение для массовой доли сажи Y_s:

$$\frac{\partial(\rho Y_s)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{U} Y_s) = \nabla \cdot \left(\left(\frac{\mu_t}{Sc_{s,t}} \right) \nabla Y_s \right) + R_s \tag{13}$$

2.6. Немного о связи моделей

Для прояснения возможных неясностей, прямо обозначим связи, присутствующие в перечисленных уравнениях. Основополагающая система уравнений Навье — Стокса предоставляет нам данные о перемещении потока смеси по измерениям, используемых потом в каждом из используемых уравнений, что в принципе естественно. Эти данные используются в том числе моделью сохранения энергии для предоставления нам данных о множестве параметров потока, в том числе о температуре, а также в системе уравнений RSM, дающих нам представление об анизотропных свойствах потока во всех направлениях, а также о кинетической энергии турбулентности k и скорости её диссипации ε.

Эти данные существенны. Полученные значения играют важную роль в модели не перемешанного горения PDF для предоставления данных о вязких свойствах газового потока и температурных характеристиках. На их основе вычисляются среднее параметра смеси (mean mixture fraction) и дисперсия параметра смеси (mixture fraction variance), на основе которых по предрасчитанным данным можно получить содержательные характеристики различных продуктов горения.

Ну и далее, температурные характеристики и характеристики движения потока, а также параметры получаемых из системы RSM, наряду с концентрационными характеристиками сажеобразующих углеводородов образуют достаточный набор данных для расчёта образования сажи через генерацию и поверхностный рост в условиях возможного окисления.

Таким образом, получаем достаточную и ёмкую систему для моделирования большинства процессов, происходящих в реакторе при генерации частиц технического углерода.

2.7. Валидация некоторых уравнений

2.7.1. RSM.

Модель напряжений Рейнольдса (RSM, Reynolds Stress Model) представляет собой один из наиболее продвинутых подходов в рамках осреднённых по Рейнольдсу уравнений Навье-Стокса (RANS). В отличие от более простых двухпараметрических моделей (таких как $k - \varepsilon$

и $k-\omega$), которые опираются на гипотезу Буссинеска об изотропной турбулентной вязкости, RSM напрямую решает транспортные уравнения для всех шести компонент тензора напряжений Рейнольдса. Этот фундаментальный отход от упрощений наделяет модель RSM значительными преимуществами при анализе сложных турбулентных течений, что убедительно демонстрируется в обеих представленных статьях, посвящённых как горению, так и аэродинамике [22, 23].

В исследовании горения аммиачно-водородной смеси в вихревой горелке [22] модель RSM проявила себя как лучший компромисс между точностью и вычислительными затратами среди всех рассмотренных RANS-моделей. Её превосходство было особенно заметно в следующих аспектах.

— Точное описание структуры течения. В вихревых потоках формируются сложные зоны рециркуляции. В то время как стандартные $k-\varepsilon$ модели предсказывали единую внутреннюю зону рециркуляции (IRZ), модель RSM, так же как и высокоточная модель крупных вихрей (LES), смогла корректно описать её разделение на две части. Это указывает на способность RSM улавливать тонкие особенности течения, имеющие решающее значение для стабилизации пламени и смешения.

— Учёт анизотропии турбулентности. Вихревые течения по своей природе анизотропны — турбулентные пульсации в них имеют разную интенсивность по разным направлениям. Модели, основанные на изотропной вязкости, неспособны это учесть. RSM, решая уравнения для каждой компоненты напряжений, напрямую моделирует анизотропию. Именно это позволило ей, в отличие от других RANS-моделей, предсказать профиль скорости, близкий к результатам LES, с ошибкой в зонах рециркуляции менее 7 м/с.

— Повышенная точность прогнозирования температуры и характеристик пламени. Благодаря более точному описанию гидродинамики, RSM показала результаты по температуре пламени, которые были значительно ближе к данным LES (разница до 100 K с другими RANS-моделями). Это напрямую связано с тем, что RSM решает отдельные уравнения для компонент напряжений, которые влияют на перенос тепла. Как следствие, толщина пламени и его положение также были предсказаны с большей точностью.

— Улучшенное прогнозирование выбросов. Выбросы NOx критически зависят от полей температуры и времени пребывания. Модель RSM, обеспечивая более точные температурные и скоростные поля, предсказала уровень выбросов со значительно меньшей ошибкой (недооценка на 35% у других RANS-моделей) по сравнению с экспериментом, приблизившись к результатам LES. Авторы заключают, что для адекватного предсказания медленно формирующихся веществ, таких как NOx, нестационарный подход является обязательным, и RSM в этом контексте показывает себя как лучшая из RANS-моделей.

Работа [23] дополнительно подтверждает ценность RSM, используя её как основу для создания усовершенствованной модели для анализа переходных течений на крыле в транзвуковом режиме. Авторы изначально выбирают RSM, поскольку двухпараметрические модели сталкиваются с серьёзными ограничениями при наличии таких сложных явлений, как вторичные и отрывные течения; поперечные течения (crossflow) и течения в углах; эффекты сжимаемости.

Исследование показывает, что RSM является не просто более точной, но и надёжной платформой для дальнейшего усовершенствования. Её успешно объединяют с моделью перехода и добавляют поправки на сжимаемость, что позволяет с высокой точностью моделировать сложнейшие аэродинамические процессы.

Обе работы, несмотря на разницу в прикладных областях, сходятся в одном: модель напряжений Рейнольдса (RSM) является мощным инструментом, превосходящим стандартные RANS-модели. Её ключевое преимущество заключается в отказе от гипотезы изотропности

турбулентности и прямом расчёте анизотропных напряжений Рейнольдса. Это позволяет с высокой точностью описывать сложные вихревые и отрывные течения, что, в свою очередь, ведёт к более достоверному прогнозированию температурных полей, характеристик пламени и уровня вредных выбросов. Хотя RSM требует больших вычислительных ресурсов, чем модели $k-\varepsilon$ или $k-\omega$, она представляет собой оптимальный компромисс между точностью и затратами, приближаясь по качеству результатов к дорогостоящим LES-расчётам, и является незаменимым инструментом для высокоточного инженерного анализа.

2.7.2. PDF.

Моделирование турбулентного горения — одна из сложнейших задач в вычислительной гидродинамике. Сложность заключается в нелинейном взаимодействии между хаотичным движением жидкости (турбулентностью) и чрезвычайно быстрыми и сложными химическими реакциями. Традиционные подходы часто требуют значительных упрощений, что снижает точность прогнозов. Работы [24, 25] демонстрируют мощь и преимущества метода транспортных PDF (transported PDF) как передового инструмента для высокоточного моделирования таких систем.

Главное и фундаментальное преимущество PDF-подхода, которое выделяется в обеих статьях, заключается в том, что химические реакции учитываются точно, без осреднения. В традиционных моделях осредняются уравнения для концентраций и температуры, что приводит к появлению нелинейных членов (скоростей химических реакций), которые невозможно замкнуть без введения гипотез и упрощённых моделей.

PDF-подход обходит эту проблему, моделируя не осреднённые значения, а саму функцию плотности вероятности (PDF) для набора скалярных величин (состав смеси, температура). Поскольку химические реакции происходят на молекулярном уровне, их скорости являются функцией мгновенных, а не осреднённых значений. В рамках PDF-метода эти вычисления производятся напрямую для каждой «частицы» в стохастическом ансамбле, что полностью исключает ошибки, связанные с осреднением химических источников.

В [24] PDF-подход применяется к одной из самых сложных промышленных систем. Здесь горение является гетерогенным (двухфазным), включая газовую фазу (воздух, продукты сгорания); твёрдую фазу (частицы угля); процессы массо- и теплообмена между фазами: выход летучих (деволатилизация), горение коксового остатка и радиационный теплообмен.

Имею место следующие особенности.

— Высокая точность прогнозов: Модель успешно предсказала распределение температур, концентраций ключевых компонентов (O_2, CO_2, CO) и степень выгорания угля в полупромышленной печи, показав отличное согласие с экспериментальными данными.

— Анализ упрощённых моделей: Транспортный PDF-подход позволил провести критический анализ допущений, используемых в более простых «предполагаемых» PDF-методах (presumed PDF). Было показано, что стандартные гипотезы (например, о статистической независимости состава смеси и энтальпии или о бета-распределении для PDF) не выполняются в реальном пламени и приводят к значительным ошибкам в прогнозах. Это доказывает, что транспортный PDF-подход не только точнее, но и служит инструментом для проверки и улучшения инженерных моделей.

— Детальная физика: Метод позволяет учесть флуктуации состава газа, которые «видят» частицы угля, что влияет на скорость их выгорания.

[25] посвящена моделированию горения в предварительно перемешанных пламенах, где взаимодействие турбулентности и химии особенно тонкое. Ключевой проблемой здесь является моделирование молекулярного смешения (микросмешения), которое определяет скорость выравнивания концентраций и температуры на малых масштабах.

Выделяются следующие особенности.

— Обобщённая модель скалярной частоты смешения (GC-модель): Авторы предложили новую, более фундаментальную модель для частоты смешения. В отличие от стандартных

подходов, которые часто требуют эмпирических констант и применимы лишь в определённых режимах горения (например, в режиме «ламинарных пламячков»), GC-модель является универсальной.

— Физическая обоснованность: GC-модель динамически вычисляет интенсивность смешения на основе локальных характеристик потока, учитывая как влияние турбулентности, так и косвенное влияние химии. Быстрая реакция создаёт очень резкие градиенты температуры и концентраций, что, в свою очередь, интенсифицирует диффузионные процессы и микросмешение. GC-модель успешно улавливает этот важный физический эффект.

— Широкий диапазон применимости: благодаря своей универсальности, предложенный PDF-подход смог точно смоделировать пламёна в различных режимах — от режима «ламинарных пламячков» (flamelet) до режима «распределённой реакции» (distributed combustion), что является большим достижением.

Несмотря на более высокие вычислительные затраты по сравнению с традиционными инженерными моделями, транспортный PDF-подход является мощным и незаменимым инструментом для исследований и разработок, где требуется максимальная точность и глубокое понимание физики турбулентного горения.

3. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

3.1. Реактор 1 (простой случай с перемешиванием)

3.1.1. Геометрия и дискретизация модели.

В данном разд. представлены результаты численного моделирования процесса образования технического углерода (ТУ) в реакторе, геометрия которого основана на конфигурации, описанной в работе [19]. Целью данного этапа исследования является анализ распределения ключевых параметров процесса при использовании обобщённой модели, включающей гидродинамику несущей фазы, модель горения на основе фракции смеси (PDF) и двухстадийную модель образования сажи Теснера — Магнуссена — Хертагера.

Рассматриваемый реактор (см. рис. 1) представляет собой осесимметричную печь малого масштаба, предназначенную для производства технического углерода из газообразного сырья.

Основные элементы конструкции описаны ниже.

Предкамера (Precombustor): здесь происходит сжигание топлива (природного газа), подаваемого аксиально, с технологическим воздухом, который вводится через два тангенциальных патрубка для создания закрученного потока горячих газов.

Зона смешения (Mixing Zone): В эту зону, расположенную вблизи выхода из предкамеры, радиально впрыскивается сырьевой природный газ (метан). Резкое расширение канала на выходе из «горловины» (choke) способствует интенсивному перемешиванию сырья с горячими продуктами сгорания.

Реактор (Reactor): Основная часть установки, где происходят процессы термического разложения сырья и формирования частиц технического углерода.

Для численного моделирования была создана трёхмерная расчётная область, которая затем была дискретизирована с использованием неструктурированной сетки (см. рис. 2). Расчётная сетка состоит из приблизительно 100 000 смешанных ячеек (преимущественно тетраэдрических с возможными призматическими элементами в пристеночных областях) и около 40 000 узлов. Сгущение сетки применялось в областях с ожидаемыми высокими градиентами параметров, таких как зоны впрыска топлива и сырья, а также в зоне смешения.

3.1.2. Постановка математической модели.

Численное моделирование выполнялось с использованием пакета ANSYS Fluent. Была решена система осреднённых по Рейнольдсу уравнений Навье — Стокса (RANS), включающая уравнение неразрывности (1), уравнения сохранения импульса (2), уравнение сохранения энергии (4).

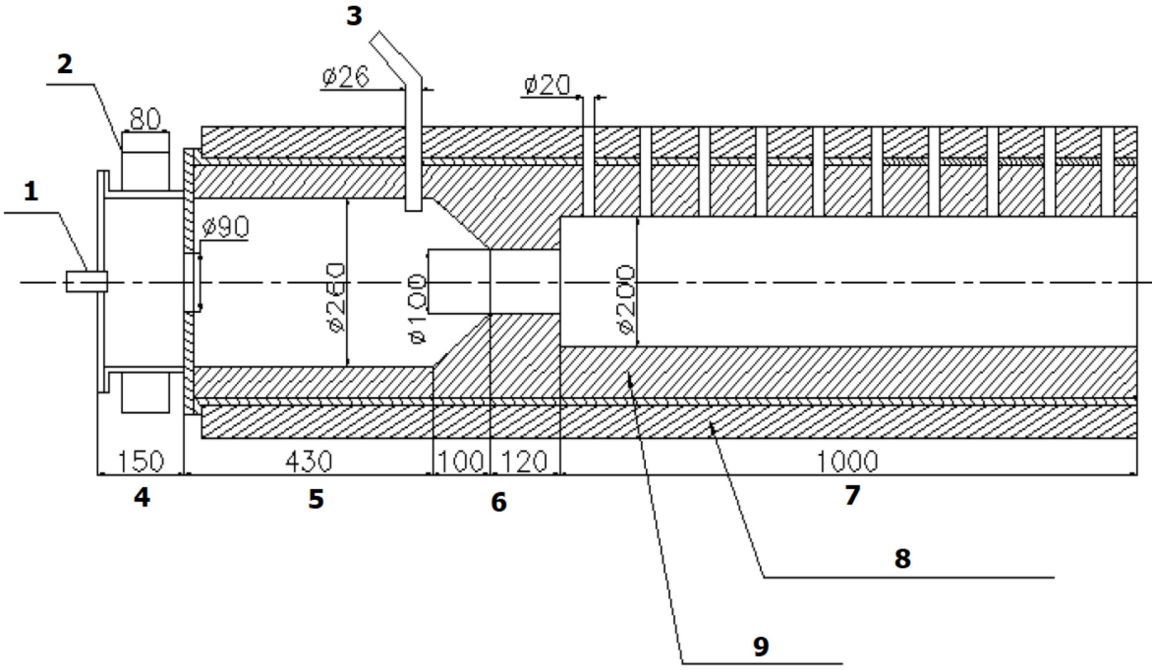


Рис. 1. Схема реактора простой геометрии, используемого в численном моделировании:
1 — осевой вход топлива; 2 — тангенциальный вход воздуха;
3 — вход углеводородного сырья; 4 — вихревая горелка;
5 — камера предварительного сгорания; 6 — зона перемешивания; 7 — реактор;
8 — термоизоляция; 9 — огнеупор

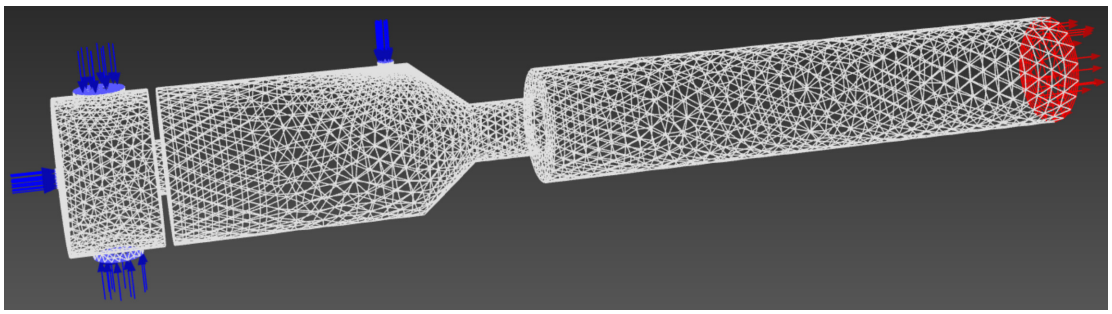


Рис. 2. Расчётная сетка, использованная для моделирования течения
в реакторе простой геометрии

Для замыкания системы уравнений RANS использовались следующие модели.

Модель турбулентности: модель напряжений Рейнольдса (Reynolds Stress Model, RSM), как описано в разд. 2.4, для адекватного учёта анизотропии турбулентности и сложных вихревых структур течения, характерных для данной геометрии.

Модель горения: метод фракции смеси (Mixture Fraction) с использованием функции плотности вероятности (PDF) для учёта турбулентно-химического взаимодействия (разд. 2.5). Предполагалось состояние химического равновесия для продуктов сгорания топлива.

Модель образования сажи: двухстадийная модель Теснера — Магнуссена — Хертагера, описывающая процессы зародышеобразования (нуклеации) и окисления сажи (разд. 2.6).

Использовались следующие граничные условия.

Вход топлива (аксиальный, предкамера): расход 0.15 м^3/мин, температура 673 K, состав: CH_4.

Входы воздуха (тангенциальные, предкамера): суммарный расход 1.4 м^3/мин, тем-

пература 300 K, состав: N_2 (0.77 массовых долей), O_2 (0.23 массовых долей).

Вход сырья (радиальный): расход 0.3 м^3/мин, температура 300 K, состав: CH_4.

Стенки реактора: адиабатические, с условием отсутствия трения (frictionless). Это допущение принято для упрощения на данном этапе исследования, фокусируясь на основных процессах в потоке.

Выход из реактора: условие постоянного статического давления (pressure outlet).

Важным аспектом постановки задачи являлся подбор параметров на входах (расходы, температуры) с целью оптимизации суммарного выхода твёрдого углерода. Эта оптимизация проводилась итерационно: варьированием входных условий добивались таких полей температуры и концентраций компонентов газовой фазы (рассчитанных с помощью модели фракции смеси), которые приводили бы к максимальному образованию сажи согласно двухстадийной модели Теснера — Магнуссена — Хертагера суммарно с твёрдым углеродом — продуктом сгорания сырья, получаемого из метода фракции смеси.

Для дискретизации конвективных членов во всех транспортных уравнениях использовались схемы второго порядка точности (Second-Order Upwind). Критерий сходимости решения для невязок всех уравнений был установлен на уровне 10^{-4}.

3.1.3. Результаты численного моделирования и их анализ.

Ниже представлены поля распределения ключевых параметров, полученные в результате численного моделирования для описанной конфигурации реактора и условий.

На рис. 3 показано распределение осреднённой массовой доли метана в реакторе.

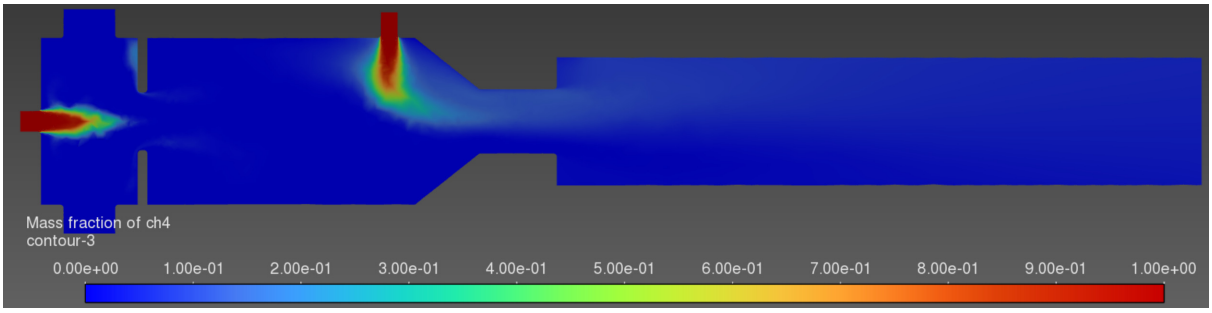


Рис. 3. Распределение осреднённой массовой доли метана (CH_4) в реакторе

Видно, что метан, как топливо для предкамеры, подаётся аксиально и быстро выгорает. Сырьевой метан впрыскивается радиально и его концентрация максимальна вблизи точек ввода. По мере смешения с горячими газами и продвижения вдоль реактора, концентрация сырьевого метана уменьшается за счёт его термического разложения и участия в реакциях неполного сгорания, приводящих к образованию предшественников сажи.

Распределение осреднённой температуры в объёме реактора представлено на рис. 4.

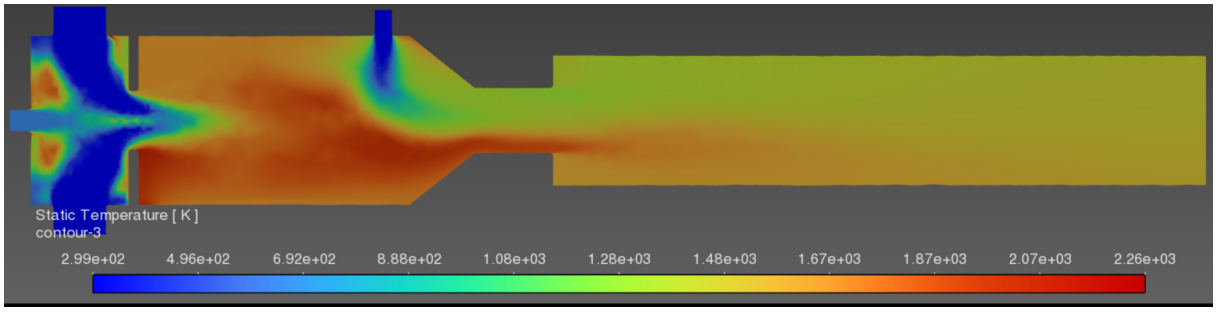


Рис. 4. Распределение осреднённой температуры (K) в реакторе

Максимальные температуры наблюдаются в предкамере и зоне смешения, где происходит интенсивное горение топлива. Далее, по мере продвижения потока вдоль реактора и подмешивания холодного сырья, а также за счёт эндотермических процессов разложения метана, температура постепенно снижается. Температурное поле является критически важным, так как оно определяет кинетику как реакций горения, так и процессов образования и окисления сажи.

На рис. 5 показано распределение нормированной концентрации зародышей сажи (элементарных частиц).

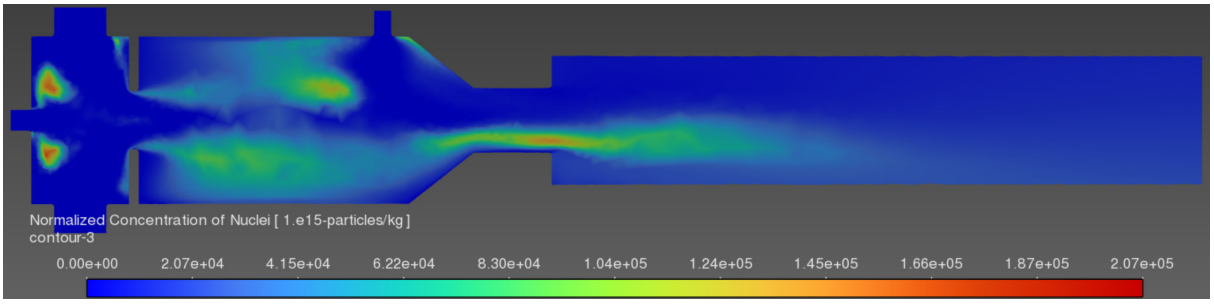


Рис. 5. Распределение нормированной концентрации зародышей сажи (частиц/кг)

Зародыши сажи образуются в результате термического разложения метана. Наибольшая их концентрация наблюдается в областях, где сырьевой метан смешивается с высокотемпературными газами, создавая благоприятные условия для пиролиза. Эти зоны расположены сразу после ввода сырья и в начальной части реакторной зоны.

Распределение осреднённой массовой доли сформировавшейся сажи (ТУ) показано на рис. 6.

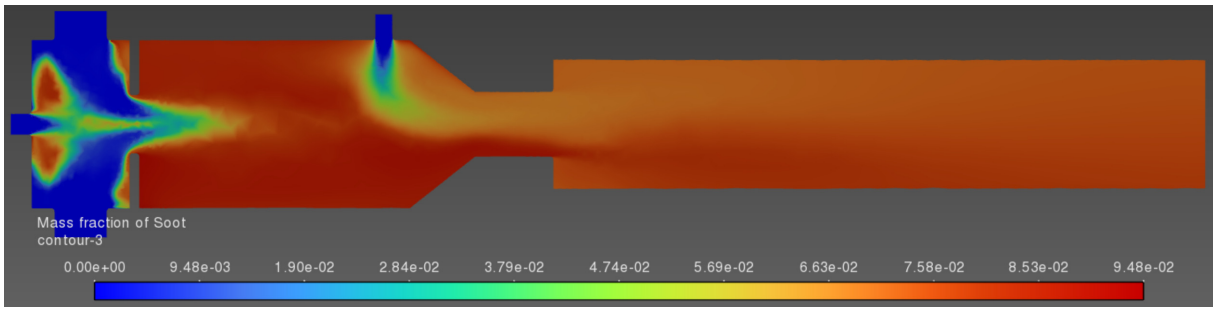


Рис. 6. Распределение осреднённой массовой доли сажи (технического углерода)

Области с высокой концентрацией сажи коррелируют с зонами наличия зародышей и подходящих температур для роста частиц сажи. Основное формирование сажи происходит в реакторной части, после зоны интенсивного смешения и начального пиролиза. В этих областях температура достаточно высока для роста частиц, но уже не так высока, чтобы доминировало их полное окисление.

На рис. 7 показано распределение массовой доли твёрдого углерода, представляющего собой конечный продукт, оставшийся после процессов горения и окисления.

Наибольшая концентрация твёрдого углерода наблюдается в дальней части реактора, где температура потока снижается. Это указывает на то, что сформировавшиеся частицы сажи, не успевшие окислиться в более горячих зонах, переносятся потоком и аккумулируются здесь.

Анализ других химических компонентов: помимо представленных основных параметров, для полного понимания процессов важно анализировать распределение и других химических компонентов. Краткие выводы по ним приведены ниже.

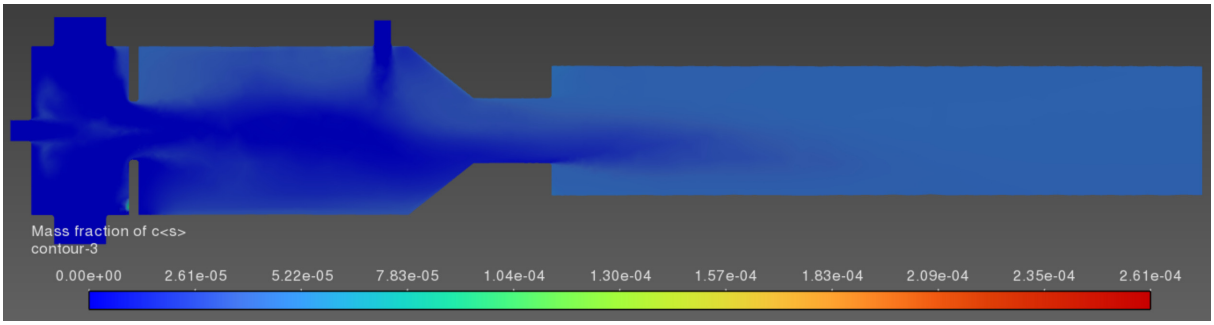


Рис. 7. Распределение осреднённой массовой доли твёрдого углерода (C(s))

Водород (H_2): является побочным продуктом разложения метана. Его концентрация максимальна в зонах пиролиза.

Оксид углерода (CO): продукт неполного сгорания, его концентрация высока в зонах с недостатком кислорода.

Диоксид углерода (CO_2): продукт полного сгорания, максимален в зонах с достаточным количеством кислорода (предкамера).

Гидроксильный радикал (OH): важный окислитель, в том числе и для сажи. Его концентрация высока в активных зонах горения.

Проведённый численный эксперимент на реакторе простой геометрии позволил получить качественные картины распределения основных параметров процесса образования технического углерода. Результаты демонстрируют логичную последовательность процессов.

— Высокотемпературное горение топлива в предкамере.

— Смешение горячих газов с сырьевым метаном.

— Термическое разложение метана с образованием зародышей сажи в зонах с высокой температурой.

— Рост частиц сажи на зародышах.

— Частичное окисление сажи в высокотемпературных зонах с наличием окислителя.

— Перенос и накопление твёрдого углерода в более холодной части реактора.

Полученные поля распределений служат основой для дальнейшего анализа и оптимизации процесса.

3.2. Реактор 2 (реактор ОмскТУ)

3.2.1. Геометрия и дискретизация модели.

В данном разд. представлены результаты численного моделирования процесса образования технического углерода (ТУ) в реакторе иной конфигурации, характеризующейся радиальной симметрией и непрерывной подачей высокотемпературного теплоносителя (продуктов сгорания природного газа), в который осуществляется радиальный впрыск углеводородного сырья [20]. Данная постановка в большей степени соответствует некоторым промышленным конструкциям и позволяет исследовать влияние гидродинамики сплошного потока на процессы сажеобразования. Учитывая повышенный интерес к данной конфигурации, для численного моделирования использовалась более детальная расчётная сетка.

Рассматриваемый реактор (см. рис. 8) представляет собой цилиндрическую камеру, осевой вход которой предназначен для подачи сплошного потока горячего газа-теплоносителя. Углеводородное сырьё (метан) впрыскивается радиально через шесть инжекторов (сопел), равномерно расположенных по окружности в плоскости, перпендикулярной оси реактора. Такая конфигурация обеспечивает интенсивное перемешивание сырья с горячим потоком и инициирует процессы пиролиза и последующего образования ТУ.

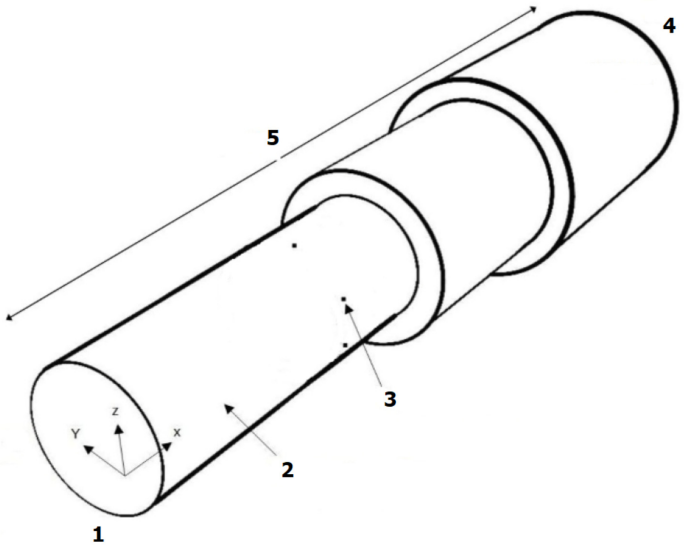


Рис. 8. Схема реактора ОмскТУ с предположением цикличности:
1 — вход газа теплоносителя (280 мм); 2 — твёрдые стенки; 3 — сопла (2.8 мм);
4 — выход (504 мм); 5 — длина установки (≈ 3 м)

Учитывая осевую симметрию течения и равномерное расположение инжекторов, для сокращения вычислительных затрат моделирование проводилось на секторе реактора, составляющем 1/6 полной геометрии, с применением соответствующих условий симметрии на боковых гранях сектора.

Для численного моделирования была создана трёхмерная расчётная область данного сектора, которая затем была дискретизирована с использованием неструктурированной сетки (см. рис. 9).

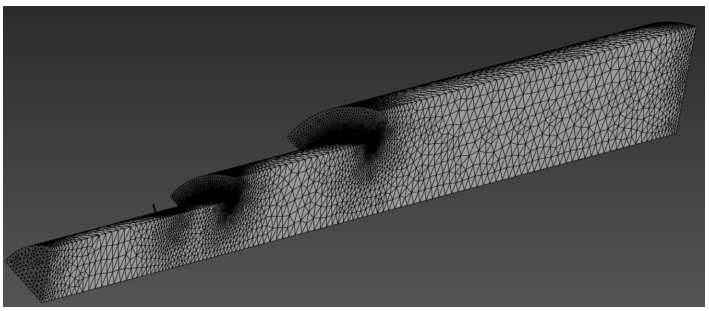


Рис. 9. Расчётная сетка (сектор 1/6) для реактора ОмскТУ

Расчётная сетка является более подробной по сравнению с предыдущим случаем и состоит из приблизительно 500 000 смешанных ячеек и 100 000 узлов. Особое внимание при построении сетки уделялось областям вблизи инжекторов сырья и зоне их взаимодействия с основным потоком теплоносителя, где ожидаются наиболее интенсивные процессы смешения и химических реакций.

3.2.2. Постановка математической модели.

Численное моделирование выполнялось с использованием пакета ANSYS Fluent. Система уравнений, описывающая течение и процессы сажеобразования, аналогична той, что использовалась в разд. 3.1, и включает уравнение неразрывности (1), уравнения сохранения импульса (2), уравнение сохранения энергии (4).

Для замыкания системы уравнений RANS использовались те же модели, что и в предыдущем вычислительном эксперименте.

Модель турбулентности: модель напряжений Рейнольдса (RSM) (Глава 2.4).

Модель горения (для теплоносителя и взаимодействия с сырьём): метод фракции смеси (Mixture Fraction) с PDF-подходом (Глава 2.5).

Модель образования сажи: двухстадийная модель Теснера — Магнуссена — Хертагера (2.6).

Использовались следующие граничные условия.

Вход теплоносителя (продукты сгорания природного газа): скорость 28 м/с, температура 1673 K.

Вход сырья (CH_4, через радиальные инжекторы): скорость 27.07 м/с, температура 300 K.

Стенки реактора: адиабатические, с условием отсутствия трения (frictionless).

Боковые грани сектора: условия симметрии.

Выход из реактора: условие постоянного статического давления (pressure outlet).

Оптимизация граничных условий на входах также являлась частью постановки задачи: параметры потоков теплоносителя и сырья подбирались с целью максимизации выхода технического углерода, аналогично предыдущему случаю, путём анализа влияния полей температуры и концентраций (полученных из PDF-модели) на скорости образования сажи по модели Теснера — Магнуссена — Хертагера.

Использовались следующие численные параметры.

— Для дискретизации конвективных членов во всех транспортных уравнениях использовались схемы второго порядка точности (Second-Order Upwind).

— Критерий сходимости решения для невязок всех уравнений был установлен на уровне 10^{-4}.

3.2.3. Результаты численного моделирования и их анализ.

Ниже представлены поля распределения ключевых параметров, полученные в результате численного моделирования для описанной конфигурации реактора с радиальной симметрией.

На рис. 10 показано распределение осреднённой массовой доли метана (сырья) в секторе реактора.

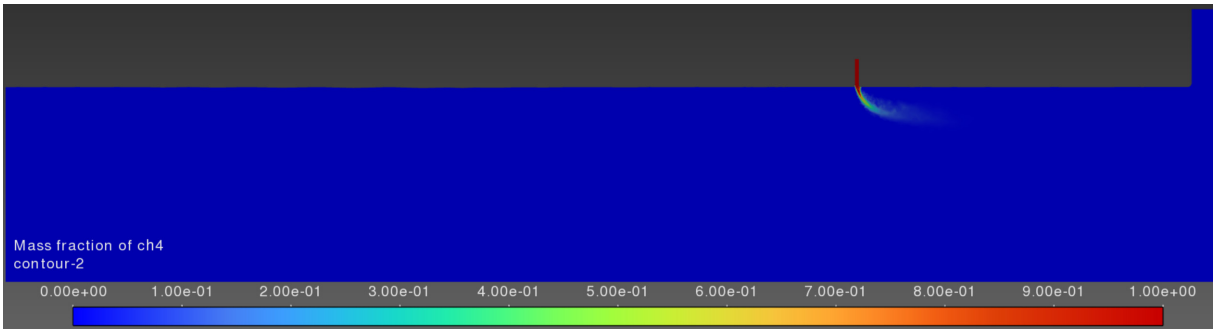


Рис. 10. Распределение осреднённой массовой доли метана (CH_4) в реакторе ОмскТУ

Струя сырьевого метана проникает из радиального инжектора в сплошной поток горячего теплоносителя. Максимальная концентрация метана наблюдается непосредственно у среза сопла инжектора и быстро уменьшается по мере смешения с основным потоком и протекания реакций пиролиза.

Распределение осреднённой температуры в объёме реактора представлено на рис. 11.

Высокотемпературный поток теплоносителя занимает основную часть объёма. В зоне впрыска холодного сырьевого метана наблюдается локальное понижение температуры. Далее,

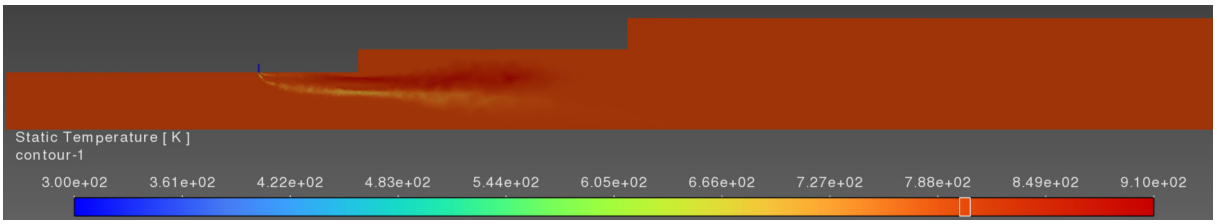


Рис. 11. Распределение осреднённой температуры (К) в реакторе ОмскТУ

по мере смешения и протекания экзотермических реакций неполного окисления и эндотермических реакций пиролиза, формируется сложное температурное поле, определяющее кинетику сажеобразования.

На рис. 12 показано распределение нормированной концентрации зародышей сажи. Зона наиболее интенсивного образования зародышей сажи располагается в области смешения струи метана с горячим теплоносителем, где достигаются оптимальные температуры для пиролиза метана. Эта зона имеет форму факела, вытянутого вдоль основного потока.

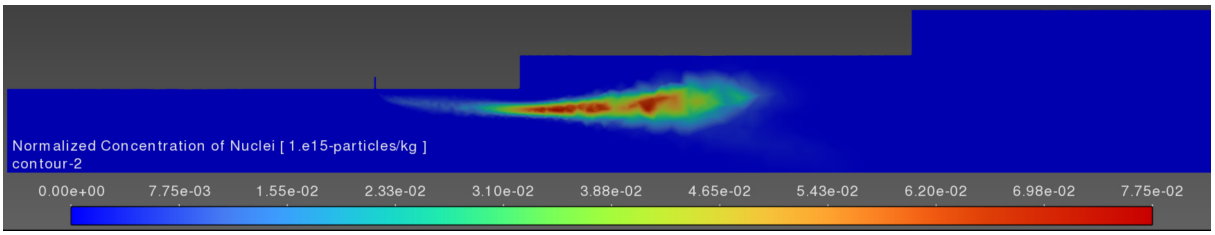


Рис. 12. Распределение нормированной концентрации зародышей сажи (частиц/кг) в реакторе ОмскТУ

Распределение осреднённой массовой доли сформировавшейся сажи (ТУ) показано на рис. 13.

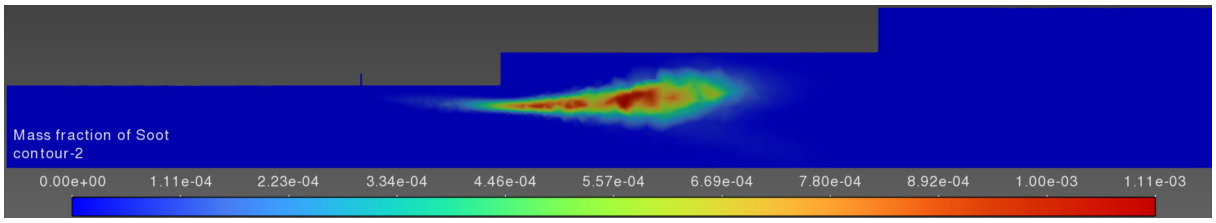


Рис. 13. Распределение осреднённой массовой доли сажи (технического углерода) в реакторе ОмскТУ

Область с максимальной концентрацией сажи следует за зоной образования зародышей и расширяется по мере роста частиц. Формирование ТУ продолжается вдоль реактора, пока существуют благоприятные температурные условия и достаточное количество предшественников.

На рис. 14 показано распределение массовой доли твёрдого углерода (конечного продукта ТУ) в реакторе.

Концентрация образуемого конечного продукта ТУ максимальна в ближайших от инжектора зонах реактора, где созданы наиболее подходящие условия для старта процесса образования сажи, а затем температура снижается (см. рис. 11), уменьшая интенсивность образования продукта.

Численное моделирование процесса образования ТУ в реакторе с предположением цикличности показало следующее:

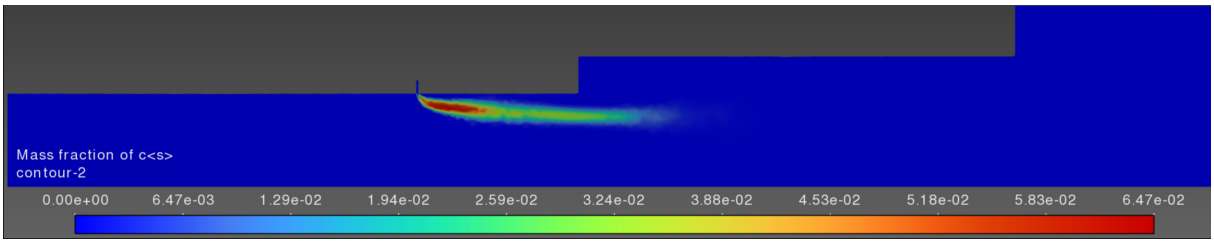


Рис. 14. Распределение осреднённой массовой доли твёрдого углерода (ТУ) в реакторе ОмскТУ

—- Характер взаимодействия газовых компонент существенно отличается от такового в реакторе с предкамерой (разд. 3.1). В данной конфигурации отсутствует предварительное смешение топливовоздушной смеси в отдельной зоне; вместо этого происходит прямое взаимодействие холодного сырья с уже сформированным высокотемпературным потоком продуктов сгорания.

— Несмотря на эти различия в гидродинамике и начальных этапах смешения, основные эффекты и стадии процесса образования ТУ (пиролиз сырья, нуклеация зародышей, рост частиц сажи и их частичное окисление) качественно совпадают с теми, что наблюдались в предыдущем численном эксперименте, а также согласуются с общими представлениями о процессе.

— Полученные картины распределения ключевых параметров (концентраций, температуры) демонстрируют физически правдоподобное поведение системы и подтверждают адекватность используемой обобщённой модели (RSM + PDF + модель Теснера — Магнуссена — Хертагера) для анализа процессов сажеобразования в различных реакторных конфигурациях.

Это указывает на перспективность дальнейшего изучения и тонкой настройки разработанной модели, включая калибровку эмпирических констант модели сажеобразования по экспериментальным данным, для повышения точности количественных предсказаний выхода и свойств технического углерода.

Заключение

В настоящей работе была успешно решена задача постановки и анализа обобщённой численной модели процесса образования технического углерода в печных реакторах. Модель базируется на фундаментальных уравнениях гидродинамики (неразрывности, сохранения импульса и энергии) и включает современные подходы к описанию ключевых физико-химических явлений: турбулентности с использованием модели напряжений Рейнольдса (RSM), турбулентного горения с помощью PDF-модели фракции смеси и кинетики сажеобразования на основе двухстадийной модели Теснера с модификациями Магнуссена и Хертагера для окисления.

Численное моделирование было проведено для двух различных конфигураций реакторов:

реактор с предкамерой сжигания топлива и последующим радиальным впрыском сырья, характеризующийся интенсивным перемешиванием;

реактор с осевым сплошным потоком горячего теплоносителя и радиальным впрыском сырья через шесть инжекторов, с использованием условия симметрии для снижения вычислительных затрат.

Полученные результаты численного моделирования для обеих конфигураций продемонстрировали способность разработанной модели качественно описывать основные стадии процесса образования технического углерода. Были получены и проанализированы поля распределения ключевых параметров: концентраций компонентов (метана, продуктов сгорания), температуры, концентрации зародышей сажи и массовой доли технического углерода (сажи и твёрдого углерода C(s)).

Основные выводы по результатам моделирования.

— Модель адекватно воспроизводит последовательность процессов: горение топлива и генерацию высокотемпературного теплоносителя, смешение теплоносителя с сырьём, термическое разложение сырья (пиролиз) с образованием зародышей сажи, рост частиц сажи за счёт поверхностных реакций и частичное окисление сажи в высокотемпературных зонах с избытком окислителя.

— Распределения параметров процесса логичны и согласуются с теоретическими представлениями: максимальные концентрации зародышей сажи наблюдаются в зонах оптимального сочетания температуры и концентрации сырьевых компонентов, а последующий рост частиц и накопление твёрдого углерода происходят по мере продвижения потока через реактор и снижения температуры.

— Сравнение двух конфигураций реакторов выявило различия в гидродинамике и характере смешения, что влияет на локализацию зон сажеобразования, однако фундаментальные стадии процесса остаются схожими.

— Использование обобщённой модели (RSM + PDF + модель Теснера) позволило получить физически правдоподобное поведение системы и подтверждает адекватность выбранного подхода для анализа процессов сажеобразования в различных реакторных конфигурациях.

Таким образом, поставленные в работе задачи были выполнены. Разработанная численная модель представляет собой ценный инструмент для качественного анализа и понимания сложных взаимосвязанных процессов в реакторах технического углерода, а также для оценки влияния конструктивных и режимных параметров на процесс сажеобразования.

Перспективы дальнейшего развития работы включают следующие направления.

Количественная верификация и калибровка модели: сравнение результатов моделирования с экспериментальными данными, полученными на пилотных или промышленных установках, для калибровки эмпирических констант в модели сажеобразования (Теснера — Магнуссена — Хертагера) и модели горения. Это позволит повысить точность количественных предсказаний.

Использование более детальных моделей сажеобразования: рассмотрение возможности применения более сложных моделей, таких как методы моментов или секционные модели, учитывающие распределение частиц по размерам и процессы коагуляции, для получения информации о дисперсности и структурности технического углерода.

Оптимизация процессов: использование разработанной и откалиброванной модели для проведения параметрических исследований с целью оптимизации технологических режимов (расходов, температур, состава сырья) и геометрии реактора для повышения выхода и качества целевого продукта.

Моделирование с жидким сырьём: расширение модели для учёта процессов распыления, испарения и пиролиза жидкого углеводородного сырья, что актуально для многих промышленных производств технического углерода.

Учёт детальной кинетики и образования ПАУ: интеграция более подробных кинетических схем пиролиза углеводородов и образования полициклических ароматических углеводородов (ПАУ) как предшественников сажи.

Детальное моделирование теплообмена: более точный учёт радиационного теплообмена, играющего значительную роль в высокотемпературных процессах с участием сажи.

Успешная реализация данных направлений позволит создать ещё более надёжный и универсальный инструмент для проектирования, оптимизации и управления процессами производства технического углерода, способствуя повышению эффективности производства и улучшению качества продукции.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследования выполнены в рамках государственного задания Института теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН (проект 125031904210-0). 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. *Зуев В.П., Михайлов В.В.* Производство сажи. М.: Химия, 1965.
2. *Кошелев Ф.Ф., Корнев А.Е., Буканов А.М.* Общая технология резины. М.: Химия, 1978.
3. *Magnussen B.F.* On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow // Proc. of the 19-th AIAA Meeting, USA, St. Louis, 1981.
4. *Tesner P.A., Snegiriova T.D., Knorre V.G.* Kinetics of dispersed carbon formation // Combust. Flame. 1971. P. 253–260.
5. *Brookes S.J., Moss J.B.* Predictions of soot and thermal radiation properties in confined turbulent jet diffusion flames // Combust. Flame. 1999. N 116. P. 486–503.
6. *Frenklach M., Wang H.* Detailed modeling of soot particle nucleation and growth // Symp. Int. Combust. 1991. N 23. P. 1559–1566.
7. *Yen A.C.Y. et al.* Multiphase CFD modelling for enclosure fires - A review on past studies and future perspectives // Experimental and Computational Multiphase Flow. 2021. P. 1–25;
DOI: 10.1007/s42757-021-0116-4
8. *Ghose P. et al.* Effect of air flow distribution on soot formation and radiative heat transfer in a model liquid fluid spray combustor firing kerosene
Int. J. Heat and Mass Transfer. 2014. N 74. P. 143–155.
9. *Palmer H.B., Cullis H.F.* The formation of carbon from gases // Chemistry and Physics of Carbon. 1965. V. 1. P. 265.
10. *Haynes B.S., Wagner H.G.* Soot formation // Progress in Energy and Combustion Science. 1981. V. 7, Iss. 4. P. 229–273.
11. *Glassman I.* Soot formation in combustion processes // Symp. Int. Combust. 1989. V. 22, Iss. 1. P. 295–311.
12. *Tesner P.A., Snegiriova T.D., Knorre V.G.* Investigating diesel engine performance and emissions using CFD // Combust. Flame. 1971. N 17. P. 253–260.
13. *Барышева О.Б., Хабибуллин Ю.Х., Садыков Р.А.* Математическая модель сажеобразования в пламени гомогенной углеводородовоздушной смеси // Известия КазГАСУ. 2017. Т. 40, № 2. С. 312–321.
14. *Агафонов Г.Л., Власов П.А., Рябиков О.Б., Смирнов В.Н.* Детальное кинетическоемоделирование-процесса сажеобразования: сравнение результатов расчетов методамимоментов, секционнымметодом и дискретнымметодом Галеркина // Горение и взрыв. 2019. Т. 12, № 4. С. 33–53;
DOI: 10.30826/CE19120404
15. *Галанин М.П., Исаев А.В., Конев С.А.* Математическая модель образования сажи при диффузионном горении толуола // Математическое моделирование. 2020. Т. 32, № 6. С. 66–80;
DOI: 10.20948/mm-2020-06-05
16. *Галанин М.П., Исаев А.В., Конев С.А.* О моделировании образования сажи при диффузионном горении углеводородных топлив // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша РАН. 2019. № 110.
17. *Jones W.P., Whitelaw J.H.* Calculation methods for reacting turbulent flows: A review // Combust. Flame. 1982. N 48, P. 1–26.
18. *Chen T., Li T., Sjöblom J., Ström H.* A reactor-scale CFD model of soot formation during high-temperature pyrolysis and gasification of biomass // Fuel. 2021. V. 303. Article number 121240;
DOI: 10.1016/j.fuel.2021.121240

19. *Moghiman M., Hosseini N., Ghodsirad M., Javadi M.* (2008). Experimental and Numerical Studies of Carbon Black Formation Through Thermal Decomposition of Waste Natural Gas // Combust. Sci. Eng. 2008. N 3; DOI: 10.1115/IMECE2008-68883

20. *Cherny S.G., Zeziulin I.V., Tarraf D., Pochuev A.P., Boronenko I.S.* The direct and inverse problems of modeling the carbon black furnace production process // Euras. J. Math. Comput. Appl. 2025. V. 13, Iss. 2. P. 13–42; DOI: 10.32523/2306-6172-2025-13-2-13-42

21. *Аксенов А.А., Жлуктов С.В., Каширин В.С. , Сазонова М.Л., Черный С.Г., Дроздова Е.А., Роде А.А.* Численное моделирование в ПК FlowVision распыла и испарения сырья в потоке газа-теплоносителя при печном производстве технического углерода // Компьютерные исследования и моделирование. 2023. Т. 15, вып. 4. С. 921–939; DOI: 10.20537/2076-7633-2023-15-4-921-939

22. *Mazzotta L., Lamioni R., Agati G., Evangelisti A., Rispoli F., Valera-Medina A., Borello D.* On the Impact of CFD Turbulence Models for Premixed NH3/H2 Combustion on Emissions and Flame Characteristics in a Swirl-Stabilized Burner // Flow, Turbulence Combust. 2025. V. 114. P. 1043–1063; DOI: 10.1007/s10494-025-00638-7

23. *Wang S.S., Wang S.* Compressibility-improved $\gamma - Re_{\theta t}$-based Reynolds stress transition model for transonic wing–body flow // AIAA Journal. 2025. DOI: 10.2514/1.J064918

24. *Stollinger M., Naud B., Roekaerts D., Beishuizen N., Heinz S.* PDF modeling and simulations of pulverized coal combustion. Part 2: Application // Combust. Flame. 2013. V. 160, N 2. P. 384-395; DOI: 10.1016/j.combustflame.2012.10.010

25. *Stollinger M., Heinz S.* (2008). PDF modeling and simulation of premixed turbulent combustion // Monte Carlo Methods and Applications. 2008. V. 14. P. 343–377; DOI: 10.1515/MCMA.2008.016

SIBERIAN JOURNAL OF INDUSTRIAL MATHEMATICS

UDC 621.45:034.3

THREE-DIMENSIONAL NUMERICAL MODEL OF THE FULL-CYCLE FURNACE PROCESS FOR CARBON BLACK PRODUCTION

© 2026 A. P. Pochuev[1], S. G. Cherny[2a]

[1] *Novosibirsk State University,*
Pirogov st., 2, Novosibirsk 630090, Russia,
[2] *Kutateladze Institute of Thermophysics SB RAS,*
Acad. Lavrentyev ave., 1, Novosibirsk 630090, Russia

E-mail: sgcherny2023@yandex.ru

Received 08.09.2025, revised 03.12.2025, accepted 13.05.2026

Abstract. This paper is devoted to the development and analysis of a generalized numerical model of the carbon black (CB) formation process in industrial furnace reactors. The relevance of the study is driven by the practical demand for improving product quality, reducing production costs, and optimizing manufacturing regimes at enterprises such as Omsk Carbon Group. The model is based on the Reynolds-Averaged Navier–Stokes (RANS) equations and incorporates modern approaches to describing the underlying physicochemical phenomena. The Reynolds Stress Model (RSM) is employed to account for complex swirling and anisotropic turbulent flow features. Turbulent combustion is simulated using the non-premixed mixture fraction Probability Density Function (PDF) model, while soot kinetics (nucleation, particle growth, and oxidation) are described via Tesner's two-step model modified by Magnussen and Hjertager. Numerical simulations were performed in ANSYS Fluent for two distinct reactor configurations: 1) a reactor with a fuel precombustion chamber and intense swirling mixing; 2) a reactor with a continuous axial flow of high-temperature carrier gas and radial feedstock injection. Spatial distributions of temperature, chemical species concentrations, soot nuclei number density, and carbon black mass fraction were obtained and analyzed. The results show that the developed model adequately reproduces the sequential stages of the process: high-temperature carrier gas generation, feedstock pyrolysis, nuclei formation in optimal temperature zones, subsequent particle growth, and partial oxidation. A comparative analysis of both configurations revealed the significant influence of hydrodynamics on the localization of soot synthesis zones while confirming the commonality of the fundamental process stages. The proposed numerical model serves as an effective engineering tool for qualitative analysis of coupled transport and reaction processes in carbon black reactors and lays the groundwork for further experimental verification, calibration, and optimization of industrial units.

Keywords: carbon black, computational fluid dynamics (CFD), ANSYS fluent, Reynolds stress model (RSM), mixture fraction PDF model, non-premixed combustion, Tesner soot model, furnace reactor, pyrolysis.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.308

REFERENCES

1. Zuev V.P., Mikhailov V.V. Proizvodstvo sazhi [Soot production]. Moscow: Chemistry, 1965 (in Russian).
2. Koshelev F.F., Kornev A.E., Bukanov A.M. Obshchaya tehnologiya reziny [General rubber technology]. Moscow: Chemistry, 1978 (in Russian).
3. Magnussen B.F. On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow. *Proc. of the 19-th AIAA Meeting*, USA, St. Louis, 1981.

English translation is published in Journal of Applied and Industrial Mathematics, 2026, Vol. 20, No. 3.

4. Tesner P.A., Snegiriova T.D., Knorre V.G. Kinetics of dispersed carbon formation. *Combust. Flame*, 1971, pp. 253–260.
5. Brookes S.J., Moss J.B. Predictions of soot and thermal radiation properties in confined turbulent jet diffusion flames. *Combust. Flame*, 1999, No. 116, pp. 486–503.
6. Frenklach M., Wang H. Detailed modeling of soot particle nucleation and growth. *Symp. Int. Combust.*, 1991, No. 23, pp. 1559–1566.
7. Yen A.C.Y. et al. Multiphase CFD modelling for enclosure fires - A review on past studies and future perspectives. *Experimental and Computational Multiphase Flow*, 2021, pp. 1–25; DOI: 10.1007/s42757-021-0116-4
8. Ghose P. et al. Effect of air flow distribution on soot formation and radiative heat transfer in a model liquid fluid spray combustor firing kerosene. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 2014, No. 74, pp. 143–155.
9. Palmer H.B., Cullis H.F. The formation of carbon from gases. *Chemistry and Physics of Carbon*, 1965, Vol. 1, pp. 265.
10. Haynes B.S., Wagner H.G. Soot formation. *Progress in Energy and Combustion Science*, 1981. V. 7, Iss. 4. P. 229–273.
11. Glassman I. Soot formation in combustion processes. *Symp. Int. Combust.*, 1989. V. 22, Iss. 1. P. 295–311.
12. Tesner P.A., Snegiriova T.D., Knorre V.G. Investigating diesel engine performance and emissions using CFD. *Combust. Flame*, 1971, No. 17, pp. 253–260.
13. Barysheva O.B., Khabibullin Yu.Kh., Sadykov R.A. Matematicheskaya model' sazheobrazovaniya v plameni gomogennoj uglevodorodovozdushnoj smesi [Mathematical model of soot formation in a homogeneous hydrocarbon-air mixture flame]. *Izvestiya KazGASU*, 2017, Vol. 40, No. 2, pp. 312–321 (in Russian).
14. Agafonov G.L., Vlasov P.A., Ryabikov O.B., Smirnov V.N. Detal'noe kineticheskoe modelirovanie processa sazheobrazovaniya: sravnenie rezul'tatov raschetov metodam i momentov, sekcionnym metodom i diskretnym metodom Galerkina [Detailed kinetic modeling of the soot formation process: Comparison of calculation results by the method of moments, the sectional method, and the discrete Galerkin method]. *Gorenie i Vzryv* [Combustion and Explosion], 2019, No. 12, pp. 33–53 (in Russian); DOI: 10.30826/CE19120404
15. Galanin M.P., Isaev A.V., Konev S.A. Matematicheskaya model' obrazovaniya sazhi pri diffuzionnom gorenii toluol [Mathematical model of soot formation during the diffusion combustion of toluene]. *Mat. Model.* [Math. Model.], 2020, Vol. 32, No. 6, p. 66–80 (in Russian).
16. Galanin M.P., Isaev A.V., Konev S.A. O modelirovanii obrazovaniya sazhi pri diffuzionnom gorenii uglevodorodnyh topliv [On modeling soot formation during the diffusion combustion of hydrocarbon fuels]. *Keldysh Institute Preprints*, 2019, No. 110 (in Russian); DOI: 10.20948/prepr-2019-110
17. Jones W.P., Whitelaw J.H. Calculation methods for reacting turbulent flows: A review. *Combust. Flame*, 1982, No. 48, pp. 1–26.
18. Chen T., Li T., Sjöblom J., Ström H. A reactor-scale CFD model of soot formation during high-temperature pyrolysis and gasification of biomass. *Fuel*, 2021, Vol. 303, Article number 121240; DOI: 10.1016/j.fuel.2021.121240
19. Moghiman M., Hosseini N., Ghodsirad M., Javadi M. (2008). Experimental and Numerical Studies of Carbon Black Formation Through Thermal Decomposition of Waste Natural Gas. *Combust. Sci. Eng.*, 2008, No. 3; DOI: 10.1115/IMECE2008-68883
20. Cherny S.G., Zeziulin I.V., Tarraf D., Pochuev A.P., Boronenko I.S. The direct and inverse problems of modeling the carbon black furnace production process. *Euras. J. Math. Comput. Appl.*, 2025, Vol. 13, Iss. 2, pp. 13–42; DOI: 10.32523/2306-6172-2025-13-2-13-42
21. Aksenov A.A., Zhluktov S.V., Kashirin V.S., Sazonova M.L., Cherny S.G., Drozdova E.A., Rode A.A. Chislennoe modelirovanie v PK FlowVision raspyla i ispareniya syr'ya v potoke gaza-teplonositelya pri pechnom proizvodstve tehnicheskogo ugleroda [Numerical simulation in FlowVision software package of raw material atomization and evaporation in a heat-carrier gas flow during the furnace production of carbon black]. *Comput. Res. Model.*, 2023, Vol. 15, No. 4, pp. 921–939 (in Russian); DOI: 10.20537/2076-7633-2023-15-4-921-939

22. Mazzotta L., Lamioni R., Agati G., Evangelisti A., Rispoli F., Valera-Medina A., Borello D. On the impact of CFD turbulence models for premixed NH3/H2 combustion on emissions and flame characteristics in a swirl-stabilized burner. *Flow, Turbulence Combust.*, 2025, Vol. 114, pp. 1043–1063; DOI: 10.1007/s10494-025-00638-7

23. Wang S.S., Wang S. Compressibility-improved $\gamma - Re_{\theta t}$-based Reynolds stress transition model for transonic wing–body flow. *AIAA Journal*, 2025; DOI: 10.2514/1.J064918

24. Stollinger M., Naud B., Roekaerts D., Beishuizen N., Heinz S. PDF modeling and simulations of pulverized coal combustion. Part 2: Application. *Combust. Flame*, 2013, Vol. 160, No. 2, pp. 384-395; DOI: 10.1016/j.combustflame.2012.10.010

25. Stollinger M., Heinz S. (2008). PDF modeling and simulation of premixed turbulent combustion. *Monte Carlo Methods and Applications*, 2008, Vol. 14, pp. 343–377; DOI: 10.1515/MCMA.2008.016

УДК 621.45:034.3

ОПТИМИЗАЦИОННОЕ ПРОЕКТИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИИ ПРОИЗВОДСТВА ТЕХНИЧЕСКОГО УГЛЕРОДА

© 2026 С. Г. Черный[1a], Д. Тарраф[2b]

[1] *Институт теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН, просп. Акад. Лаврентьева, 1, Россия 630090, Новосибирск,*
[2] *Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова, 2, Россия 630090, Новосибирск*

E-mails: [a]sgcherny2023@yandex.ru, [b]daniel.tarraf.93@gmail.com

Поступила в редакцию 12.09.2025 г.; после доработки 26.12.2025 г.; принята к публикации 13.05.2026 г.

Поставлены и решены многокритериальные оптимизационные задачи моделирования процесса распыла и испарения жидкого углеводородного сырья в реакторе печного производства технического углерода. Их решения дают регламент работы реактора, при котором достигаются наибольшие дисперсность и структурность технического углерода при минимальном его загрязнении коксом и в то же время при достаточно высоком выходе продукта. Целевые функции определяются по численному решению прямой задачи распыла и испарения сырья, сформулированной на основе трёхмерной модели Эйлера (Eulerian), принадлежащей эйлерово-эйлерову подходу к описанию многофазных течений в ПК ANSYS. В построенных таким образом целевых функциях учтена теоретическая и эмпирическая информация о влиянии параметров углеводородов в реакционной зоне на дисперсность и структурность технического углерода. В частности, учтена простейшая взаимосвязь — чем выше концентрация углеводородов в реакционной зоне, тем выше структурность технического углерода. В качестве целевой функций может быть взят коагуляционный параметр структурообразования ψ, учитывающий концентрацию, средний диаметр и средний заряд частиц технического углерода перед коагуляцией. С увеличением ψ показатель структурности частиц технического углерода возрастает. В качестве целевой функции планируется рассмотреть среднее отклонение размеров капель. На концентрацию и средний диаметр частиц перед коагуляцией, кроме температуры процесса и начальной концентрации углеводородного сырья в реакторе, оказывает влияние изменение числа ароматических колец в средней молекуле сырья. Рост колец приводит к возрастанию структурности технического углерода. В построенные в работе целевые функции также заложены механизмы достижения заданной степени мелкости распыла сырья, равномерности распределения капель, обеспечения полного испарения сырья, исключения контакта неиспарившегося сырья с футеровкой реактора (со стенкой), так как такой контакт приводит к образованию кокса. Для достижения экстремумов перечисленных функционалов варьируются скорость и температура газа-теплоносителя на входе в реактор, скорость и температура закачиваемого сырья. Оптимизационная задача решается с помощью генетического метода. Представлены результаты проведённых численных экспериментов.

Ключевые слова: технический углерод, обратная задача процесса распыла и испарения сырья в реакторе пиролизного производства технического углерода.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.309

ВВЕДЕНИЕ

Печной процесс производства технического углерода представляет собой пиролиз углеводородного сырья в потоке газа-теплоносителя — смеси продуктов сгорания природного газа с температурой до 1900°C, имеющей состав: N_2 (73%), H_2 (15%), CO_2 (O.7%) и O_2 (5%). Впрыс-

киваемое сырье, смешиваясь с газом-теплоносителем, дробится на капли, которые затем испаряются [3]. Важно, чтобы капли сырья полностью испарились до начала пиролиза, поскольку технический углерод образуется при разложении углеводородов в газообразном состоянии. При разложение жидких капель сырья при высоких температурах образуются частицы кокса, загрязняющие продукт.

На рис. 1 представлена область в окрестности места впрыска сырья в реактор.

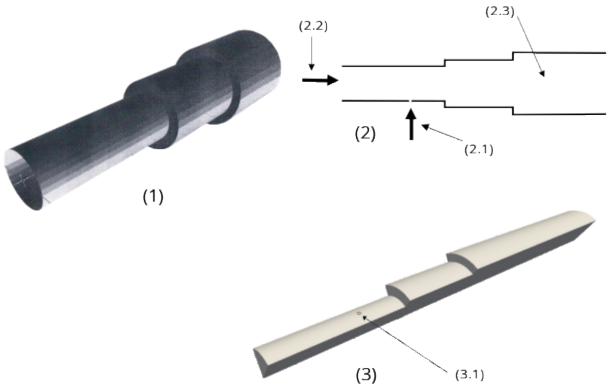


Рис. 1. Расчетная область и ее сегментация:
1 — изометрия реального реактора; 2 — схема работы реактора;
2.1 — сырье, подаваемое в реактор через 6 форсунок; 2.2 — газ-теплоноситель;
2.3 — реакционная зона; 3 — расчетная область (циклическое приближение); 3.1 — форсунка

Сырьё вводится шестью форсунками, равномерно распределёнными в окружном направлении сечения, перпендикулярного оси реактора. От степени распыла сырья форсунками и равномерности распределения капель в потоке газа-теплоносителя зависит структурность технического углерода, а также вероятность образования грита [4]. Входные параметры процесса производства технического углерода, в том числе — форма реактора, должны быть такими, при которых исключался бы контакт неиспарившегося сырья с футеровкой реактора (со стенкой). Также должны контролироваться мелкость распыла сырья, равномерность распределения капель в потоке газа-теплоносителя, при которых происходит полное его испарение до начала пиролиза и формируется оптимальная структурность технического углерода.

В настоящей работе на основе методов математического моделирования предлагается аппарат оптимизационного проектирования технологии всего процесса производства технического углерода. Решения многокритериальных оптимизационных задач моделирования процесса распыла и испарения жидкого углеводородного сырья в реакторе дают регламент работы реактора, при котором достигаются наибольшие дисперсность и структурность технического углерода при минимальном его загрязнении коксом и в то же время при достаточно высоком выходе продукта. Целевые функции определяются по численному решению прямой задачи распыла и испарения сырья. В них учитывается имеющаяся теоретическая и эмпирическая информация о влиянии параметров углеводородов в реакционной зоне на дисперсность и структурность технического углерода. Экстремумы целевых функций отыскиваются на множествах допустимых скоростей и температур закачиваемого газа-теплоносителя, а также на множестве скоростей и температур подаваемого сырья. Оптимизационная задача решается с помощью генетического метода [2]. Результаты проведённых численных экспериментов представлены в данной работе.

1. ОПИСАНИЕ ЗАДАЧИ

Объектом исследования является проточная часть реактора, составленная из трёх цилиндрических каналов с увеличивающимися диаметрами по направлению потока газа-теплоносителя, изометрическая проекция которого изображена в верхнем левом углу рис. 1. В правом верхнем углу рис. 1 представлена схема работы реактора, на которой указаны входное сечение подачи в реактор газа-теплоносителя и форсунки, через которые закачивается жидкое углеводородное сырьё. В правом нижнем углу рис. 1 изображён расчётный сегмент области реактора, переход на который допустим в силу цикличности течения в реакторе Исходные данные прямой задачи моделирования процесса распыла и испарения сырья в газе-теплоносителе приведены ниже.

— Шесть форсунок (равномерно расположены по окружности в одном сечении).

— Расход сырья на одну сырьевую форсунку $0.6\,м^3/ч$; скорость $27\,м/с$. На шесть сырьевых форсунок суммарный расход $3.6\,м^3/ч$.

— Кинематическая вязкость сырья $24.1\,мм^2/с$, при температуре $30°C$ и давлении $0{,}8\,МПа$.

— Плотность сырья $1050\,кг/м^3$, при температуре $20°C$.

— Плотность газа-теплоносителя $165\,кг/м^3$, при температуре $1860°C$ и давлении $0{,}03\,МПа$.

— Расход газа теплоносителя $93697\,м^3/ч$; скорость $422\,м/с$.

— Кинематическая вязкость газа-теплоносителя $419 \times 10^{-6}\,м^2/с$.

Предметом исследования являются газодинамические свойства процесса распыла и испарения сырья в газе-теплоносителе. Требуется определить дисперсный состав распыляемого сырья и степень его испарения.

2. ПРЯМАЯ И ОБРАТНАЯ ЗАДАЧИ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССА ПЕЧНОГО ПРОИЗВОДСТВА ТЕХНИЧЕСКОГО УГЛЕРОДА

Определим понятия «прямая» и «обратная» задачи моделирования процесса производства технического углерода в реакторе. Прямая задача численного моделирования распыла и испарения жидкого углеводорода (ЖУ) может быть представлена схематично

$$\mathbf{V} = f(\mathbf{X}), \tag{1}$$

где $\mathbf{X} = (x_1, \ldots, x_N)$ — входные параметры модели. $\mathbf{X}$ включает параметры, подверженные вариациям при решении обратной задачи, обозначим их как $\mathbf{Y} = (y_1, \ldots, y_s) \subset \mathbf{X}$. $\mathbf{V} = (V_1, \ldots, V_M)$ — выходные параметры модели. По ним определяются характеристики распыла и испарения ЖУ, которые требуется достигнуть. Обозначим их зависимость от выходных параметров через вектор $\mathbf{Z} = \mathbf{Z}(\mathbf{V}) = (Z_1, \ldots, Z_L)$.

Пусть Z^* — требуемые характеристики процесса распыла и испарения ЖУ. Тогда их получение обеспечат выходные параметры $\mathbf{V}^* = \mathbf{Z}^{-1}(\mathbf{Z}^*)$ и, следовательно, для их нахождения необходимо решить обратную задачу моделирования процесса распыла и испарения ЖУ

$$\mathbf{X}^* = f^{-1}(\mathbf{V}^*) = f^{-1}(\mathbf{Z}^{-1}(\mathbf{Z}^*)), \tag{2}$$

и извлечь $\mathbf{Y}^*$ из $\mathbf{X}^*$. Непосредственное решение уравнения (2) называется прямым методом решения обратной задачи. Решение оптимизационной задачи

$$\min_{\mathbf{Y}} F_1, \ \ldots, \ \min_{\mathbf{Y}} F_L \tag{3}$$

где

$$\mathbf{F} = \mathbf{Z}^* - \mathbf{Z}(f(\mathbf{X})) = (F_1, \ldots, F_L),$$

называется оптимизационным или итерационным методом решения обратной задачи. В работе обратная задача (2) моделирования процесса решается оптимизационным методом (3). Предварительно проводился анализ чувствительности решения прямой задачи (1) к её входным

параметрам. В результате проведённого анализа чувствительности определялись параметры $\mathbf{Y} = (y_1, \ldots, y_s) \subset \mathbf{X}$ из вектора входных параметров модели $\mathbf{X} = (x_1, \ldots, x_N)$, варьируемые в (3).

2.1. Математическая модель прямой задачи процесса печного производства технического углерода

Распыл и испарение ЖУ в потоке ГТ описывается эйлеровой моделью (Eulerian), принадлежащей эйлерово-эйлерову подходу к описанию многофазных течений в ПК ANSYS Fluent [1]. Задача решается в двухфазном приближении. Несущая фаза — ГТ и продукты испарения ЖУ (ПИЖ), дисперсная — ЖУ и его капли, образующиеся в результате распада струи ЖУ. Далее коротко перечисляются основные группы уравнений модели.

2.1.1. Уравнения движения.

Уравнение неразрывности несущей фазы:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_c \rho_c) + \nabla \cdot (\alpha_c \rho_c \mathbf{u}_c) = \dot{m}_{lc} - \dot{m}_{cl},$$

здесь α_c — объёмная доля несущей фазы, $\mathbf{u}_c$ — скорость несущей фазы, ρ_c — плотность несущей фазы, $\dot{m}_{lc}$ — массоперенос из жидкой фазы в несущую фазу, $\dot{m}_{cl}$ — массоперенос из несущей фазы в жидкую фазу. Объёмная доля жидкой фазы α_c рассчитывается по формуле $\alpha_l = 1 - \alpha_c$.

Уравнения сохранения импульса жидкой и несущей фаз:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_c \rho_c \mathbf{u}_c) + \nabla \cdot (\alpha_c \rho_c \mathbf{u}_c \mathbf{u}_c) = -\alpha_c \nabla p + \nabla \cdot (\alpha_c \hat{\tau}_{\text{eff},c}) + \alpha_c \rho_c \mathbf{g} + K(\mathbf{u}_c - \mathbf{u}_l) + \dot{m}_{lc}\mathbf{u}_{lc} - \dot{m}_{cl}\mathbf{u}_{cl}, \quad (4)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l \rho_l \mathbf{u}_l) + \nabla \cdot (\alpha_l \rho_l \mathbf{u}_l \mathbf{u}_l) = -\alpha_l \nabla p + \nabla \cdot (\alpha_l \hat{\tau}_{\text{eff},l}) + \alpha_l \rho_l \mathbf{g} + K(\mathbf{u}_l - \mathbf{u}_c) + \dot{m}_{cl}\mathbf{u}_{cl} - \dot{m}_{lc}\mathbf{u}_{lc}, \quad (5)$$

здесь p — давление, одинаково для обеих фаз, $\mathbf{g}$ — сила тяжести, K — коэффициент межфазного обмена импульсом, $\hat{\tau}_{\text{eff},c}$ — эффективный тензор напряжений несущей фазы, $\hat{\tau}_{\text{eff},l}$ — эффективный тензор напряжений жидкой фазы, ρ_l — плотность жидкости, $\mathbf{u}_l$ — скорость жидкости, $\mathbf{u}_{lc}$ и $\mathbf{u}_{cl}$ — межфазные скорости, определяются следующим образом: Если $\dot{m}_{lc} > 0$ (т. е. происходит массоперенос из жидкой фазы в несущую фазу), то $\mathbf{u}_{lc} = \mathbf{u}_l$. И если $\dot{m}_{lc} < 0$ (т. е. массоперенос происходит из несущей фазы в жидкую фазу), то $\mathbf{u}_{lc} = \mathbf{u}_c$. Аналогично, если $\dot{m}_{cl} > 0$ то $\mathbf{u}_{cl} = \mathbf{u}_c$; и если $\dot{m}_{cl} < 0$ то $\mathbf{u}_{cl} = \mathbf{u}_l$. Эффективные тензоры напряжений $\hat{\tau}_{\text{eff},c}$, $\hat{\tau}_{\text{eff},l}$ определяются следующим образом:

$$\hat{\tau}_{\text{eff},c} = \mu_{\text{eff},c}\big(\nabla \mathbf{u}_c + \nabla \mathbf{u}_c^T\big) + \frac{2}{3}(\rho_c k - \mu_{\text{eff},c} \nabla \cdot \mathbf{u}_c)\hat{I},$$

$$\hat{\tau}_{\text{eff},l} = \mu_{\text{eff},l}\big(\nabla \mathbf{u}_l + \nabla \mathbf{u}_l^T\big) + \frac{2}{3}(\rho_l k - \mu_{\text{eff},l} \nabla \cdot \mathbf{u}_l)\hat{I},$$

$$\mu_{\text{eff},c} = \mu_t + \mu_c, \quad \mu_{\text{eff},l} = \mu_t + \mu_l,$$

где μ_t — турбулентная вязкость, μ_c — вязкость несущей фазы, μ_l — вязкость жидкой фазы, k — кинетическая турбулентная энергия.

Уравнения сохранения энергии жидкой и несущей фаз:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_c \rho_c h_c) + \nabla \cdot (\alpha_c \rho_c \mathbf{u}_c) = \alpha_c \frac{\partial p}{\partial t} + (\alpha_c \hat{\tau}_{\text{eff},c}) \nabla \mathbf{u}_c - \nabla \cdot (\alpha_c \kappa_{\text{eff},c} \nabla T_c) + Q_{lc} + \dot{m}_{lc} h_{lc} + \dot{m}_{cl} h_{cl}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_l\rho_l h_l) + \nabla\cdot(\alpha_l\rho_l\mathbf{u}_l) = \alpha_l\frac{\partial p}{\partial t} + (\alpha_l\hat{\tau}_{\text{eff},l})\nabla\mathbf{u}_l - \nabla\cdot(\alpha_l\kappa_{\text{eff},l}\nabla T_l) + Q_{cl} + \dot{m}_{cl}h_{cl} + \dot{m}_{cl}h_{lc}. \quad (7)$$

Здесь h_c — явная энтальпия несущей фазы, $\kappa_{\text{eff},c}$ — эффективная теплопроводность несущей фазы, T_c — температура несущей фазы, h_l — явная энтальпия дисперсной фазы, $\kappa_{\text{eff},l}$ — эффективная теплопроводность дисперсной фазы, T_l — температура дисперсной фазы, $Q_{lc} = Q_{cl}$ — теплообмен между фазами, h_cl и h_lc межфазная энтальпия. Величины h_cl, h_lc, $\kappa_{\text{eff},c}$, $\kappa_{\text{eff},l}$ определяются следующим образом:

$$h_c = c_{p,c}(T_c - T_{\text{ref}}), \quad h_l = c_{p,l}(T_l - T_{\text{ref}}),$$
$$\kappa_{\text{eff},c} = \kappa_c + \frac{c_{p,c}\mu_t}{\text{Pr}_t}, \quad \kappa_{\text{eff},l} = \kappa_l + \frac{c_{p,l}\mu_t}{\text{Pr}_t}.$$

Здесь κ_c,κ_l — теплопроводность несущей и жидкой фаз, T_{ref} — эталонная температура, $c_{p,c}$, $c_{p,l}$ — теплоёмкости несущей и жидкой фаз, Pr_t — турбулентное число Прандтля.

2.1.2. Уравнение переноса массовой доли ПИЖ.

Уравнение переноса массовой доли ПИЖ имеет вид

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_c\rho_c Y_v) + \nabla\cdot(\alpha_c\rho_c\mathbf{u}_c Y_v) = -\nabla\cdot(\alpha_c\mathbf{J}_v) + \dot{m}_{lc} - \dot{m}_{cl},$$

здесь Y_v — массовая доля ПИЖ, $\mathbf{J}_v$ — диффузионный поток ПИЖ:

$$\mathbf{J}_v = -\left(\rho_c D_{v,c} + \frac{\mu_t}{\text{Sc}_t}\right)\nabla Y_v,$$

где D_{vmc} — коэффициент массовой диффузии ПИЖ, Sc_t — турбулентное число Шмидта, μ_t — турбулентная вязкость.

Все физические свойства несущей фазы ϕ_c (плотность, вязкость, теплоёмкость и т.д.) рассчитываются на основе соответствующих свойств ГТ ϕ_g и ПИЖ ϕ_v следующим образом:

$$\phi_c = Y_v\phi_v + (1 - Y_v)\phi_g.$$

2.1.3. Замыкание системы.

Коэффициент межфазного обмена импульсом. В уравнения (4) и (5) входит коэффициент межфазного обмена импульсом:

$$K = \frac{\rho_l f}{6\tau_l}d_l A,$$

здесь A — межфазная поверхность, d_l — диаметр капель жидкой фазы, f — функция сопротивления, τ_l — время релаксации частиц, которое определяется следующим образом:

$$\tau_l = \frac{\rho_l d_l^2}{18\mu_c}.$$

Функция сопротивления f определяется из формул Шиллера и Науманна [5]:

$$f = \frac{C_D\text{Re}}{24},$$

где

$$C_D = \begin{cases} 24(1 + 0.15\text{Re}^{0.687})/\text{Re}, & \text{Re} \leqslant 1000, \\ 0.44, & \text{Re} > 1000, \end{cases}$$

Re — относительное число Рейнольдса: $\text{Re} = \dfrac{\rho u_c - u_l d_l}{\mu_c}$.

Межфазная поверхность A определяется следующим образом: $A = 6/d_l$.

Коэффициента теплообмена. В уравнениях (6) и (7) коэффициент теплообмена определяется следующим образом:

$$Q_{lc} = \frac{\kappa_c \mathrm{Nu}_l}{d_l} A(T_l - T_c).$$

Здесь κ_c — теплопроводность несущей фазы, Nu_l — число Нуссельта жидкой фазы, моделируется с помощью модели Ранца — Маршалла [6, 7]

$$\mathrm{Nu}_l = 2 + 0.6\,\mathrm{Re}^{0.5}\,\mathrm{Pr}^{1/3},$$

где Pr — число Прандтля несущей фазы, определяется следующим образом: $\mathrm{Pr} = \dfrac{c_{p,c}\mu_c}{\kappa_c}$, где $c_{p,c}$ — удельная теплоёмкость несущей фазы.

Массоперенос. В ANSYS Fluent имеется несколько способов моделирования процесса испарения. Наиболее распространённой и простой является модель испарения Ли [8]. Одним из требований этой модели является задание параметров временной релаксации. Эти параметры находятся по экспериментальным данным. В другой модели испарения массоперенос происходит через границу раздела фаз с объёмной скоростью, зависящей от градиента массовой концентрации переносимых частиц в фазах,

$$\dot{m}_{lc} = k_{lv} A(K^{\rho}_{vl}\rho_l - \rho_v)$$

Здесь k_{lv} — объёмный коэффициент массопереноса, K^{ρ}_{vl} — равновесное соотношение. Параметры k_{lv} и K^{ρ}_{vl} рассчитываются по закону двух сопротивлений, впервые предложенному Whitman [9],

$$\frac{1}{k_{lv}} = \frac{1}{k_v} + \frac{K^{\rho}_{vl}}{k_l}.$$

Здесь, k_l — коэффициент массообмена жидкости, k_v — коэффициент массоотдачи ПИЖ. Равновесное соотношение K^{ρ}_{vl} определяется по формуле Рауля:

$$K^{\rho}_{vl} = \frac{p}{P^{v}_{\mathrm{sat}}}, \tag{8}$$

где P^{v}_{sat} — давление насыщения продуктов испарения жидкости. Его зависимость от температуры дисперсной фазы ($P^{v}_{\mathrm{sat}} = P^{v}_{\mathrm{sat}}(T_l)$) является характеристикой жидкости и обуславливает степень её испарения.

2.2. Метод решения прямой задачи процесса печного производства технического углерода

Для решения представленных в разд. 2.1 уравнений эйлеровой модели (Eulerian) из эйлерово-эйлерова подхода к описанию многофазных течений используется численный метод конечных объёмов. Первым шагом этого метода является дискретизация, в ходе которой область реактора разделяется на расчётные ячейки. Для каждой ячейки, уравнения сохранения для решаемых функции $\phi_c = (\alpha_c, \mathbf{u}_c, h_c)$ и $\phi_l = (\mathbf{u}_l, h_l)$ могут быть представлены в виде

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V \rho_c\phi_c dV + \oint\limits_A \rho_c\phi_c\mathbf{u}_c\hat{\mathbf{n}}_A\,dA = \oint\limits_A \Gamma_{\phi_c}\nabla\Phi_c\,dA + \int\limits_V S_{\phi_c}\,dV,$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\int\limits_V \rho_l\phi_l\,dV + \oint\limits_A \rho_l\phi_l\mathbf{u}_l\hat{\mathbf{n}}_A\,dA = \oint\limits_A \Gamma_{\phi_l}\nabla\Phi_l dA + \int\limits_V S_{\phi_l}\,dV,$$

где V — объём ячейки, A — поверхности ячейки. Эти уравнения, поскольку каждая ячейка представляет собой многогранник, могут быть записаны следующим образом:

$$\frac{\partial \rho_c \phi_c}{\partial t} V + \sum_f \rho_{c,f} \phi_c \mathbf{u}_{c,f} A_f = \sum_f \Gamma_{\phi_c} \nabla \Phi_{c,f} A_f + S_{\phi_c} V,$$
$$\frac{\partial \rho_l \phi_l}{\partial t} V + \sum_f \rho_{l,f} \phi_l \mathbf{u}_{l,f} A_f = \sum_f \Gamma_{\phi_l} \nabla \Phi_{l,f} A_f + S_{\phi_l} V.$$

Здесь величины $\rho_c, \phi_c, \Gamma_{\phi_c}, S_{\phi_c}, \rho_l, \phi_l, \Gamma_{\phi_l}, S_{\phi_l}$ являются значениями в центрах ячеек, а $\rho_{c,f}, \mathbf{u}_{c,f}, \phi_{c,f}, \rho_{l,f}, \mathbf{u}_{l,f}, \phi_{l,f}$ — в центре грани ячейки, A_f — площадь поверхности расчётной ячейки f.

Далее проводится дискретизация уравнений по пространственным переменным. При этом противопоточная аппроксимация второго порядка используется для момента $\phi_f = \phi + \nabla\phi \cdot \mathbf{r}$. Здесь ϕ и $\nabla\phi$ — значение в центре ячейки и его градиент в ячейке выше по потоку, $\mathbf{r}$ — вектор, направленный от центра ячейки к центру грани. Центрально-разностная аппроксимация второго порядка используется для давления и энтальпии

$$\phi_f = \frac{1}{2}(\phi_0 + \phi_1) + \frac{1}{2}(\nabla\phi_0 \mathbf{r}_1 + \nabla\phi_1 . \mathbf{r}_2),$$

где индексы 0 и 1 относятся к соседним ячейкам, которые разделяет грань f. Аппроксимация градиента функции осуществляется методом наименьших квадратов, реализованным на неструктурированных сетках на плоскости с «плохой» геометрией ячеек

$$\nabla\phi = (\mathbf{d}^T \mathbf{d})^{-1} \mathbf{d}^T (\phi_N - \phi),$$

где $\mathbf{d}$ — расстояния между центром ячейки и центрами её соседей; $(\phi_N - \phi)$ — разность значений ϕ в центре ячейки и в центрах её соседей. Ошибка метода зависит от геометрии ячеек. Весовые коэффициенты в методе наименьших квадратов подобраны таким образом, что аппроксимация градиента функции значительно улучшена.

Полученная в результате дискретизации дифференциальных уравнений система линейных алгебраических уравнений с неизвестной функцией $\phi = (\alpha_c, \mathbf{u}_c, h_c, \mathbf{u}_l, h_l)$ представляется в виде $A\phi = B$ и решается связанным методом. В связанном методе уравнения моментов и уравнение для давления, выведенное из уравнения неразрывности, решаются одновременно. Связанная схема обеспечивает надёжную и эффективную реализацию одной фазы для стационарных потоков с производительностью, превосходящей производительность схем сегрегированного решения. Связанный алгоритм на основе давления является альтернативным сегрегированному алгоритму на основе плотности и давления с помощью связи давления и скорости типа SIMPLE. Для переходных течений применение связанного алгоритма необходимо, когда качество сетки плохое или если используются большие временные шаги.

2.3. Обоснование достоверности решения прямой задачи

Для подтверждения адекватности предложенной численной модели процесса распыла и испарения сырья в реакторе печного производства технического углерода решены с использованием созданного для её реализации кода теоретически или экспериментально изученные в имеющихся литературных источниках тестовые задачи.

2.3.1. Распыл воды в потоке воздуха. В [10] нами численно решена задача о распыле воды в потоке воздуха в канале прямоугольного сечения, показанном на рис. 2.

В [11] задача исследована также численно с использованием VOF подхода в программном комплексе ANSYS Fluent, а в [12] — экспериментально. Поток воздуха со скоростью 120,4 м/с

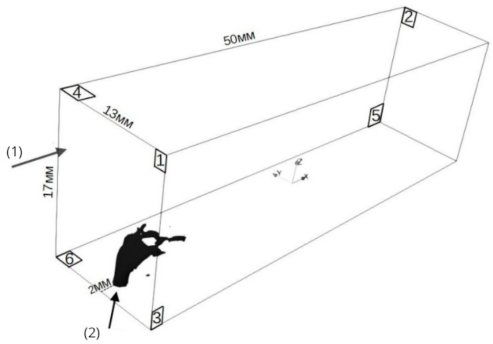


Рис. 2. Распыление воды в прямоугольном канале:
1 — участок, через который воздух входит в канал; 3, 4, 5, 6 — твёрдые стенки канала;
2 — участок, через который воздух выходит из канала;
(1) — воздух; (2) — вода

подаётся во входное сечение (1) прямоугольного канала с боковыми твёрдыми стенками (3), (4), (5) и (6), а выходит из канала через сечение (2). Вода со скоростью 10,83 м/с закачивается в канал через отверстие в стенке (6) перпендикулярно потоку воздуха. На рис. 3 показаны центральные линии струй дисперсной фазы, полученные в [10] численно по эйлеровой модели для трёх различных значений её параметра — характерного размера частиц дисперсной фазы d: 10^{-5} м — сплошная красная линия, 3×10^{-4} м — пунктирная зелёная линия, 10^{-4} м — сплошная синяя линия. Пунктирной чёрной линией обозначены данные из [11], а сплошной чёрной линией данные из [12].

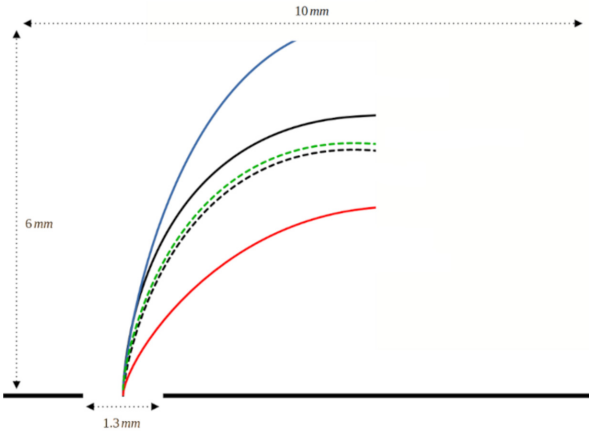


Рис. 3. Сравнение осевых линий струи.
Эксперимент [12] — сплошная чёрная линия; VOF [11] — штриховая чёрная линия;
Эйлеров подход [10]: $d = 10^{-4}$ — сплошная синяя линия;
$d = 3 \times 10^{-4}$ — штриховая зелёная линия; $d = 10^{-5}$ — сплошная красная линия

2.3.2. Распыл керосина в камере сгорания газовых турбин. В [10] решена ещё одна задач, экспериментально исследованная в [13]. В плоский канал, через который прокачивается со скоростью 120 м/с воздух, распыляется керосин (см. рис. 4).

На рис. 5 представлено распределение объёмной доли керосина, взятое из решения задачи с использованием построенного кода. С помощью созданного в [10] метода интерпретации распределения объёмной доли жидкости в терминах её капель распыл керосина был представлен в виде распределения множества капель различных размеров.

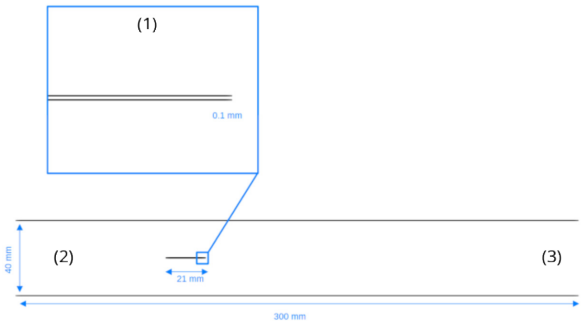


Рис. 4. Распыление керосина в поток воздуха в плоском канале:
1 — сопло керосина; 2 — вход воздуха; 3 — выход смеси

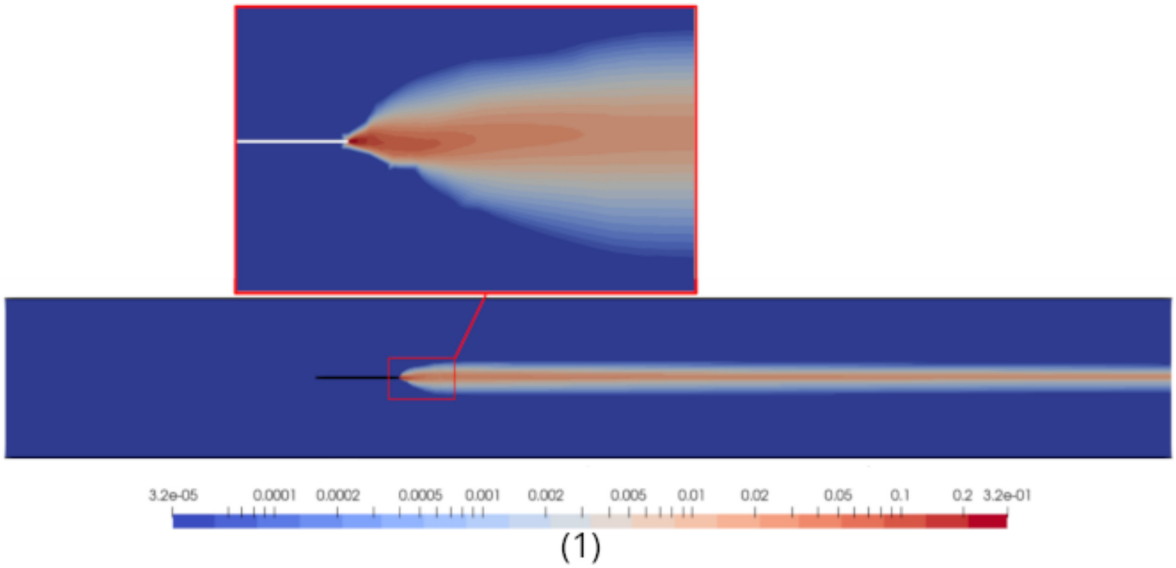


Рис. 5. Распределение объёмной доли керосина:
1 — объёмная доля керосина (логарифмическая шкала)

По распределению капель посчитана скорость испарения керосина V_{evap}/V_0. Здесь в числителе разность объёмных потоков капель керосина в сечении x_0, в котором керосин подаётся в поток воздуха, и контрольных сечениях $x_1 = 30$ мм, $x_2 = 60$ мм, $x_3 = 100$ мм, and $x_4 = 150$ мм, расположенных вниз по потоку от x_0. В знаменателе — поток в x_0. Также вычислены средние диаметры Заутера SMD в четырёх поперечных полосах канала, имеющих ширину 10мм, а их центры находятся в точках $x_1 = 30$ мм, $x_2 = 60$ мм, $x_3 = 100$ мм, and $x_4 = 150$ мм. Сравнения скорости испарения V_{evap}/V_0 и среднего диаметра Заутера SMD капель керосина, полученных численно и экспериментально в [13], приведены на рис. 6.

2.3.3. Влияние концентрации капель на степень испарения . В [14] проводится эксперимент, в котором смесь капель воды и воздуха подаётся в цилиндр, наполненный воздухом. Температура воздуха в цилиндре больше температуры закачиваемой в него смеси. Капли испаряются и по достижению конца цилиндра средний диаметр долетевших капель оказывается меньше среднего диаметра капель на входе в цилиндр. Влияние среднего диаметра капель воды на входе в цилиндр на степень их испарения устанавливается в [14]. В [15] разработанный авторами настоящей работы код применён для численного анализа влияния концентрации капель на входе в цилиндр на степень испарения. Во входном сечении цилиндра отношение объёма воды во всех каплях к объёму воздуха в распыляемой смеси взято $\gamma_{\text{in}} = 10^{-3}$, скорость

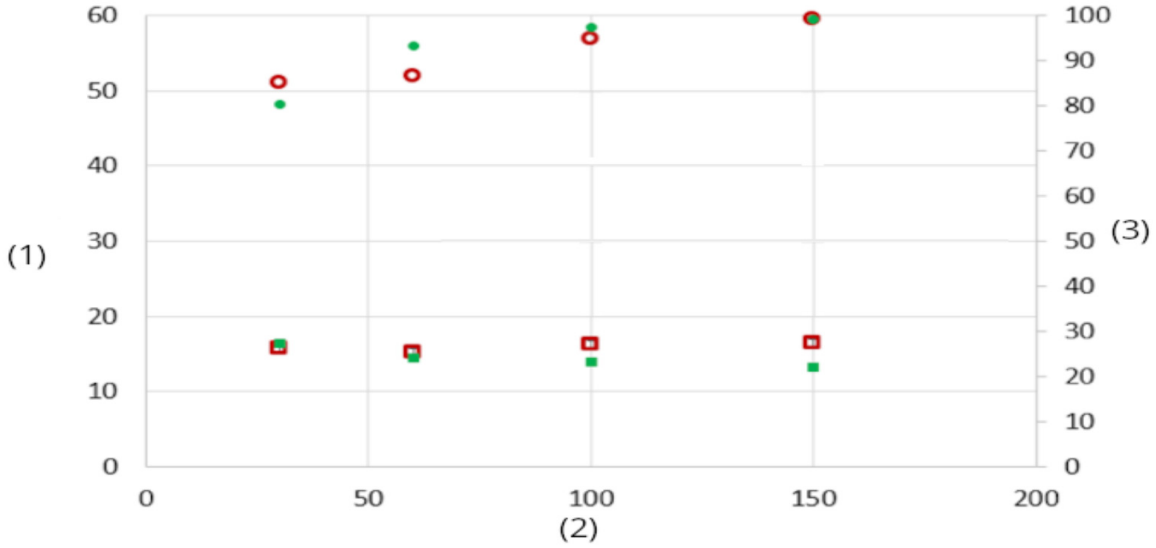


Рис. 6. Сравнение скорости испарения капель керосина V_{evap}/V_0 (кружки) и среднего диаметра Заутера (квадраты); экспериментальные значения — красный цвет, расчётные значения — зелёный цвет; (1) — SMD (μм); (2) — x (мм); (3) – V_{evap}/V_0

капель воды задана равной $\mathbf{u}_d = 3$ м/с, а скорость воздуха $\mathbf{u}_a = 1.5$ м/с. Средний размер капель поддерживается во входном сечении постоянным, равным R_d. Температура смеси $T = 300$ K, температура воздуха в цилиндре $T = 1070$ K. В [14] степень испарения ΔR рассчитывается по R_d и размеру капель в выходном сечении цилиндра R_d^* по формуле $\Delta R = (R_d - R_d^*)/R_d \cdot 100\%$. В [15] степень испарения определяется по формуле $\Delta F = \dfrac{F_{\text{in}} - F_{\text{out}}}{F_{\text{in}}} \cdot 100\,\%$, где F_{in} — массовый расход воды во входном сечении цилиндра, F_{out} — массовый расход воды в выходном сечении цилиндра. В расчёте размер капель жидкой фазы во входном сечении d_l.

Степени испарения ΔF рассчитывались для пяти значений d_l (0.07 мм, 0.1 мм, 0.145 мм, 0.19 мм и 0.245 мм). На рис. 7 зависимость $(d_l, \Delta F)$ показана синими линиями и прямоугольниками, соответствующими заданным значениям d_l. Зависимость $(R_d, \Delta R)$ показана чёрным цветом.

2.4. Методы решения обратных задач

Методы решения обратных задач подразделяются на две группы: прямые методы решения обратных задач и итерационные, которые в данной работе также называются оптимизационными методами. Отметим основные особенности каждой из групп.

2.4.1. Прямые методы решения обратных задач. Как было показано в начале разд. 2 требуемая характеристика процесса распыла и испарения жидкого углеводорода Z^* будет достигаться, если входные параметры модели определить прямым решением обратной задачи

$$\mathbf{X}^* = f^{-1}(\mathbf{V}^*) = f^{-1}(\mathbf{Z}^{-1}(\mathbf{Z}^*)). \tag{9}$$

При возможности непосредственного решения уравнения (2) данный подход будет наиболее приемлемым для решения обратной задачи, поскольку отпадает необходимость многократного решения прямой задачи. Однако прямые методы часто оказываются неустойчивыми. Либо требуют обращения матриц очень большого размера, возникающих при дискретизации уравнения (2).

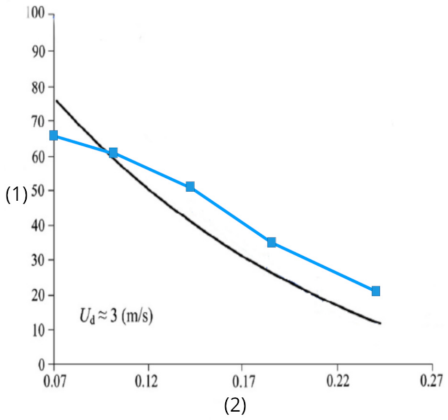


Рис. 7. Сравнение степеней испарения,
полученных экспериментально (черная линия) [14]
и численно (синяя линия с квадратами) [15];
(1) — $\Delta R\,(\%)$; (2) — $R_d\,(\text{мм})$

2.4.2. Оптимизационные методы решения обратных задач. При невозможности непосредственного решения уравнения (2) решение обратной задачи сводят к задаче минимизации

$$\min_{\mathbf{Y}} F_1, \ldots, \min_{\mathbf{Y}} F_L. \tag{10}$$

где

$$\mathbf{F} = \mathbf{Z}^* - \mathbf{Z}\,(f(\mathbf{X})) = (F_1, \ldots, F_L).$$

Метод, схематично описанный уравнениями (3), называется оптимизационным или итерационным методом решения обратной задачи. Если в прямых методах требуется установить связи между параметрами и улучшаемыми характеристиками. То в оптимизационных методах из-за необходимости многократного решения прямой задачи важно выбрать подходящий (быстрый) метод для её решения. Также, немаловажно подобрать эффективные функционалы и ограничения, которые обеспечат наилучшую сходимость к глобальному экстремуму. Оптимизационные методы решения обратных задач по сравнению с прямыми методами незначительно зависят от конкретики задачи, поэтому подходят для решения классов задач из различных областей. Такая универсальность оптимизационных методов позволила применить для решения рассматриваемой в настоящей статье обратной задачи распыла и испарения сырья в реакторе производства технического углерода разработанный ранее при участии одного из соавторов оптимизационный метод и программный код для его реализации [2]. Два класса методов образуют семейство оптимизационных методы решения обратных задач. Это – детерминированные и стохастические методы. Особенностью детерминированного алгоритма является его свойство получать один и тот же результат для одних и тех же исходных данных. Стохастические методы предполагают вероятностный характер используемого алгоритма. И те, и другие подразделяются на одноцелевые и многоцелевые оптимизационные методы. Решением многоцелевой задачи является множество оптимальных решений, называемое фронтом Парето, каждое из которых лучше любого другого по крайней мере по одному целевому функционалу и не улучшаемо одновременно по всем функционалам. Наиболее популярным стохастическим методом является эволюционный генетический алгоритм (ГА) [2]. ГА применим для решения многоцелевых задач, не требует гладкости целевых функционалов, не стопориться в локальных экстремумах, поскольку осуществляет поиск оптимального решения, одновременно анализируя множество текущих наборов параметров, которые эволюционируют от поколения к поколению в соответствии с установленными правилами. Возможно распараллеливание расчёта.

2.5. Многоцелевая оптимизация

2.5.1. Определения понятия многокритериальной (многоцелевой) оптимизации.

Определение 1. Многокритериальная оптимизация — процесс одновременной оптимизации двух или более конфликтующих целевых функций в заданной области определения.

Определение 2. Не существует единого мнения, что следует считать наилучшей альтернативой в задаче с несколькими целевыми функциями, которые противоречивы и достигают максимума в различных точках множества альтернатив. Поэтому оценка качества системы в случае векторного показателя качества является одной из главных проблем.

Определение 3. В случае нескольких целевых функций, которые оптимизируются одновременно, находятся оптимальные компромиссы между конкурирующими целевыми функциями.

Определение 4. Многоцелевая оптимизация относится к процессу одновременной оптимизации двух или более конфликтующих целей с учётом определённых ограничений. Должны быть сбалансированы несколько целей. В отличие от одноцелевой оптимизации, которая фокусируется на одной цели, многоцелевая оптимизация стремится найти набор оптимальных решений, известных как оптимальные решения по Парето, где ни одна цель не может быть улучшена без ухудшения другой.

2.5.2. Постановка задачи многоцелевой оптимизации. Задача МО формулируется следующим образом. Найти значения параметров $\mathbf{Y} = (y_1, \ldots, y_s) \subset \mathbf{X}$, обеспечивающих минимальные значения L функционалов:

$$\min_{\mathbf{Y}} F_1, \ \ldots, \ \min_{\mathbf{Y}} F_L, \tag{11}$$

при наличии фазовых ограничений:

$$\mathbf{Y} = \{y_i \mid y_{L,i} \leqslant y_i \leqslant y_{R,i}\} \tag{12}$$

и целевых ограничений:

$$\varphi_i \leqslant 0, \quad j = 1, \ldots, L.$$

2.5.3. Шаги эволюционного генетического алгоритм решение задачи многоцелевой оптимизации. Стохастический эволюционный оптимизационный генетический алгоритм (ГА) многоцелевой оптимизации, описывает эволюцию популяции индивидуумов в течение нескольких поколений [16–18]. Изменения популяции индивидуумов в процессе смены поколений подчиняются законам искусственного отбора, подобным законам теории естественного отбора Дарвина. Индивидуумом называется набор параметров $\mathbf{Y} = (y_1, \ldots, y_s) \subset \mathbf{X}$, определяющих процесс образования технического углерода в реакторе. ГА состоит из следующих этапов (шагов).

Начальная популяция индивидуумов. Работа ГА начинается с формирования начальной популяции, отбор p_0 индивидуумов которой происходит случайным образом (formed randomly). В начальную популяцию включается индивидуум, соответствующий штатному режиму работы реактора.

Целевые функционалы $f_1, \ldots, f_L$ для каждого индивидуума популяции. Для каждого индивидуума построенной популяции вычисляются значения целевых функционалов и ограничений.

Ранг индивидуума популяции.
Для последующего отбора наилучших индивидуумов на основе значений целевых функционалов рассчитывается ранг индивидуума, характеризующий его качество [16]. Индивидууму, для которого ни один из индивидуумов популяции не лучше его по всем функционалам присваивается ранг равный 1. Ранг остальных индивидуумов вычисляется по формуле

$$\mathrm{rank}(\mathbf{Y}^i) = 1 + a_i,$$

где a_i — число индивидуумов текущей популяции, лучших по всем функционалам индивидуума $\mathbf{Y}^i$. Чем больше ранг индивидуума, тем он дальше от фронта Парето. При решении задачи (11) индивидуумы должны удовлетворять ограничениям (12). При создании популяции не все индивидуумы им удовлетворяют. Ранг таким индивидуумам назначается в зависимости от того, насколько сильно не выполняются ограничения. Ранг лучшего из группы решений, для которых не выполняется хотя бы одно из ограничений, больше, чем самый высокий из группы индивидуумов, для которых ограничения выполнены.

Критерий качества индивидуума F_r, основанный на его ранге.
Для каждого индивидуума популяции вычисляется критерий качества, основанный на ранге:

$$F_r(\mathbf{Y}^i) = 1 + \sum_{k=1}^{\mathrm{rank}(\mathbf{Y}^i)-1} \eta(k),$$

где $\eta(k)$ — число индивидуумов ранга k.

Расстояния ρ между индивидуумами.
Расстояние между индивидуумами вычисляется в пространстве функционалов по формуле:

$$\rho(i,j) = \max_{k=1,\dots,K} f_k(\mathbf{Y}^i) - f_k(\mathbf{Y}^j).$$

Нишевое число m_i индивидуума.
Нишевое число m_i — это оценка того, как много индивидуумов популяции располагается в окрестности (нише) индивидуума i. Вычисляется по всей популяции

$$m_i = \sum_{j \in \mathrm{Pop}} \mathrm{Sh}(\rho(i,j)),$$

где $\rho(i,j)$ — расстояние между индивидуумами $\mathbf{Y}^i$ и $\mathbf{Y}^j$ а $\mathrm{Sh}(\rho)$ — функция разделения такая, что $\mathrm{Sh}(\rho) = 1$, $\mathrm{Sh}(\rho \geqslant \sigma_{\mathrm{shape}}) = 0$,

$$\mathrm{Sh}(\rho) = \begin{cases} 1 - \rho/\sigma_{\mathrm{shape}}, & \rho < \sigma_{\mathrm{shape}}, \\ 0, & \rho \geqslant \sigma_{\mathrm{shape}}, \end{cases}$$

где σ_{shape} — подбираемый эмпирически параметр разделения.

Функция качества F_s
Функция качества определяется следующим образом: $F_s = F_r \cdot m$. Индивидуумы, находящиеся на расстоянии σ_{shape}, увеличивают свои функции качества и сходимость происходит в нише радиуса σ_{shape}. Сходимости всей популяции не случается. Целевые функционалы нормируются и область поиска X отображается в гиперкуб с единичным ребром $[0,1]^L$.

Отбор.
Выбирается доля Tr индивидуумов, которым соответствуют наименьшие значения функции

качества F_s, $0 < \mathrm{Tr} < 1$. При этом часть популяции распределяется около некоторого числа различных пиков в пространстве поиска X. Около каждого пика располагаются индивидуумы в количестве, пропорциональном высоте пика [17]. Остальные индивидуумы равномерно распределяются вдоль фронта Парето [18].

Рекомбинация.
Из отобранных $T_r \cdot p$ индивидуумов случайным образом выбираются два идивидуума-родителя $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_N)$ и $\mathbf{y} = (y_1, \ldots, y_N)$, которые производят новый индивидуум $\mathbf{w} = (w_1, \ldots, w_N)$ по формуле $w_i = x_i + \alpha_i(y_i - x_i)$, где α_i — случайное число между d и $1+d$. Параметр d называется параметром рекомбинации. Необходимо отметить, что α_i может быть больше единицы и меньше нуля, так что рекомбинация включает в себя элемент экстраполяции. На этапе рекомбинации число индивидуумов восстанавливается до p.

Мутация.
Все индивидуумы слегка меняются следующим образом:

$$w_i = w_i \pm \mu(w_{L,i} - w_{R,i})\delta,$$

где $\mu \in [0, 1]$ – мутационный параметр, $\delta = 2^{-16\gamma}$, а число γ — случайное число между 0 и 1.

Клонирование.
Без изменения из предыдущего поколения копируются в новое поколение все индивидуумы, удовлетворяющие ограничениям и имеющие ранг 1.

Переход на шаг 2, пока не будет рассчитано заданное число поколений N_{Gen}.

3. Расчёты

3.1. Результаты расчётов прямой задачи

3.1.1. Расчётная область и сетка. Моделирование выполняется в 60°C секторе реактора с одной форсункой (см. рис. 8) при предположении, что картины взаимодействия сырья с теплоносителем и испарения сырья в остальных пяти сегментах реактора такие же, как в рассматриваемом.

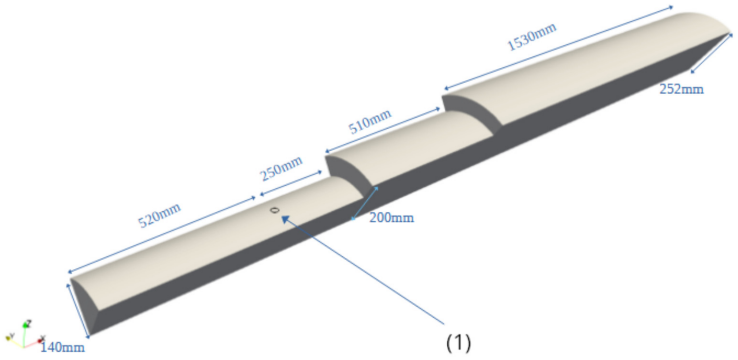


Рис. 8. Уменьшенная расчётная область реактора:
предполагается осевая периодичность потока 60 градусов;
(1) — положение сопла (диаметр 2.8 мм)

На боковых гранях сектора задаются условия симметрии:
1. отсутствует нормальная к границе компонента скорости;
2. нет прилипания на данной границе, то есть поток ничто не тормозит;

3. тангенциальная компонента скорости на границе равна скорости в приграничной ячейке.

Сетка (см. рис. 9) была адаптирована один раз (не динамически) вблизи форсунки и содержит около 190 000 ячеек.

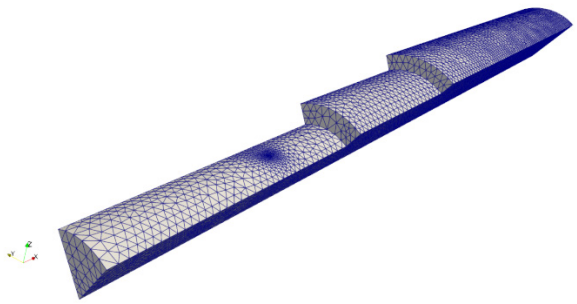


Рис. 9. Статически адаптированная сетка в 60-градусном циклическом сегменте потока

3.1.2. Давление насыщения. Давление насыщения в уравнении (8) P^v_{sat} рассматривается как функция температуры жидкой фазы. Поведение кривой давления насыщения обуславливает интенсивность испарения частиц сырья: кривая с более сильным ростом обуславливает более интенсивное испарение. Зависимость между температурой и давлением насыщения была установлена, как на рис. 10.

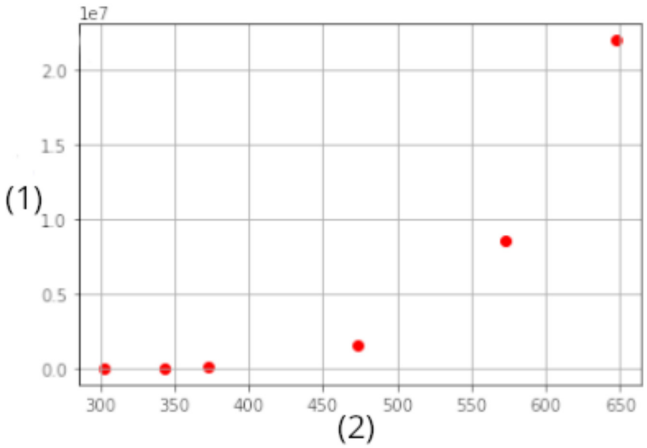


Рис. 10. Зависимость между давлением насыщения P^v_{sat} (Па) — (1) и температурой T_c (К) — (2)

3.1.3. Средний диаметр капель (характерный размер частиц дисперсной фазы). Для замыкания эйлеровой модели (Eulerian), являющейся одним из трёх эйлерово-эйлеровых подходов к описанию многофазных течений в ПК ANSYS, требуется значение среднего диаметра капель жидкой фазы d (характерный размер частиц дисперсной фазы). На рис. 11 приведена рассчитанная нами зависимость между степенью испарения жидкой фазы и характерным размером частиц дисперсной фазы d. На основе приведённой зависимости в дальнейшем в Eulerian модели мы в качестве характерного размера частиц задавали $d = 1.4$ мм, который соответствует степени испарения 64%, полученной на этой же задаче в ПК FlowVision [19].

3.1.4. Сходимость решения прямой задачи по времени. Для верификации численного решения прямой задачи была изучена сходимость решения численной модели по времени

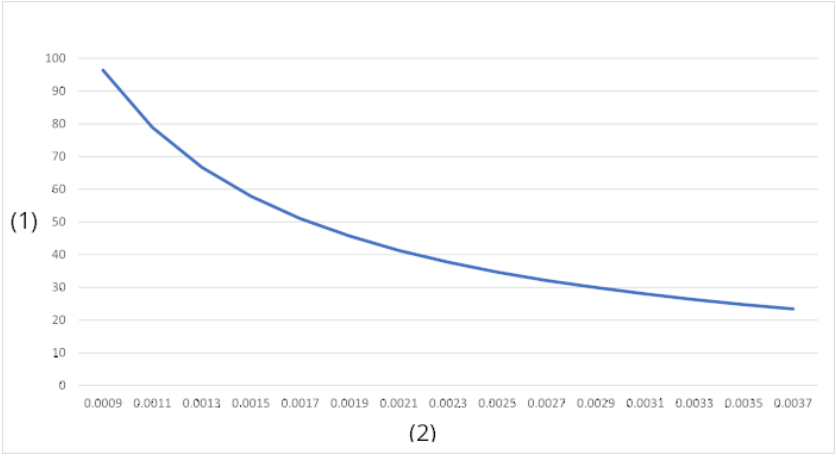


Рис. 11. Зависимость между степенью испарения (%) — (1)
и средним диаметром капли d (мм) — (2)

к стационарному состоянию. На рис. 12 продемонстрирована сходимость распределения давления вдоль оси реактора. Приведённые результаты численных исследований свидетельствуют об установлении решения нестационарной задачи при различных начальных данных к единственному стационарному решению. Таким образом, показано свойство разработанной численной модели надёжно получать единственное стационарное решение методом установления

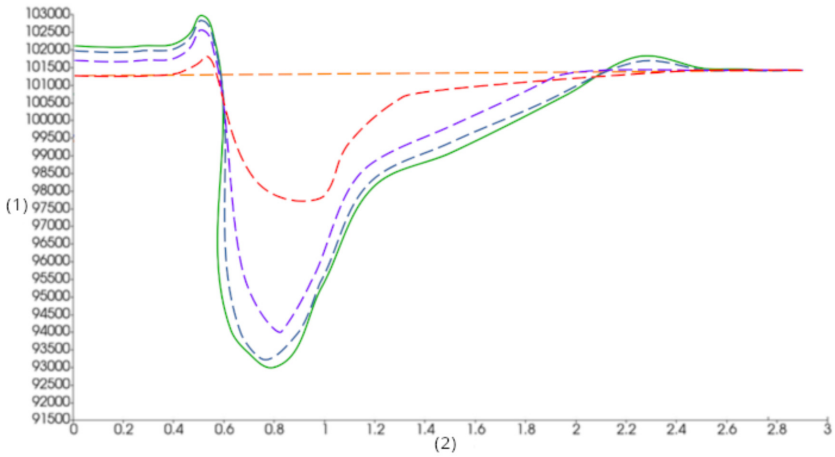


Рис. 12. Сходимость распределения давления (Па) — (1) вдоль оси реактора (м) — (2).
Цвет обозначает временные шаги:
оранжевый — начальный; красный — 100 шагов; фиолетовый — 400 шагов;
синий — 800 шагов; зеленый — 966 шагов (установившийся режим)

3.1.5. Результаты моделирования процесса производства технического углерода. Модели эйлерово-эйлерова подхода многофазных течений жидкости можно условно отнести к двум классам по их способности описывать первичный распад струи жидкости в потоке газа. Особенность (явление) первичного распада жидкой фазы в нашей задаче возникает в окрестности форсунки в момент, когда сырьё вбрызгивается в поток газа.

В [19] эта же задача в такой же трёхмерной постановке численно решается в приближении эйлерово-эйлерова подхода, но методом, основанным на конвективно-диффузионных уравнениях для концентрации, массы и импульса частиц. Используемая в [19] модель описывают эволюцию уже существующей дисперсной фазы. Но её зарождение в момент первичного распада жидкости эта модель не описывает.

В [19] для старта численного метода задаётся искусственное распределение диаметров капель на форсунке, построенное на основе экспериментально полученных данных, которые связывают объёмное распределение капель по их диаметрам. В [19] основанная на конвективно-диффузионных уравнениях для концентрации, массы и импульса частиц модель реализована на платформе FlowVision для моделирования процесса распыла и испарения жидких углеводородов в реакторе технического углерода. Модель включает две фазы: дисперсную фазу, представляющую распылённые жидкие капли углеводорода, и несущую фазу, состоящую из смеси газов (теплоноситель и продукты испарения жидкости). Движение фазы-теплоносителя описывается уравнениями Навье — Стокса, а конвективно-диффузионные уравнения концентрации частиц, импульса и энергии используются для описания динамики дисперсной фазы.

Используемая нами Eulerian модель из ПК ANSYS также принадлежит эйлерово-эйлерову классу моделей, но в отличии от модели [19] обладает способностью описывать первичный распад струи жидкости в потоке газа. Это подтверждено решениями тестовых задач в разделах «Распыл воды в потоке воздуха» и «Распыл керосина в камере сгорания газовых турбин». Далее приводятся сравнения картин течений, полученных в [19] и в настоящей работе по двум выше описанным моделям. Картины течений показаны в плоскости симметрии сектора реактора.

На рис. 13–15 представлены распределения объёмных долей сырья, массовых долей испарившегося сырья и температур несущей фазы, соответственно. Вверху на всех рисунках приведены данные из [19], а внизу — полученные в настоящей работе.

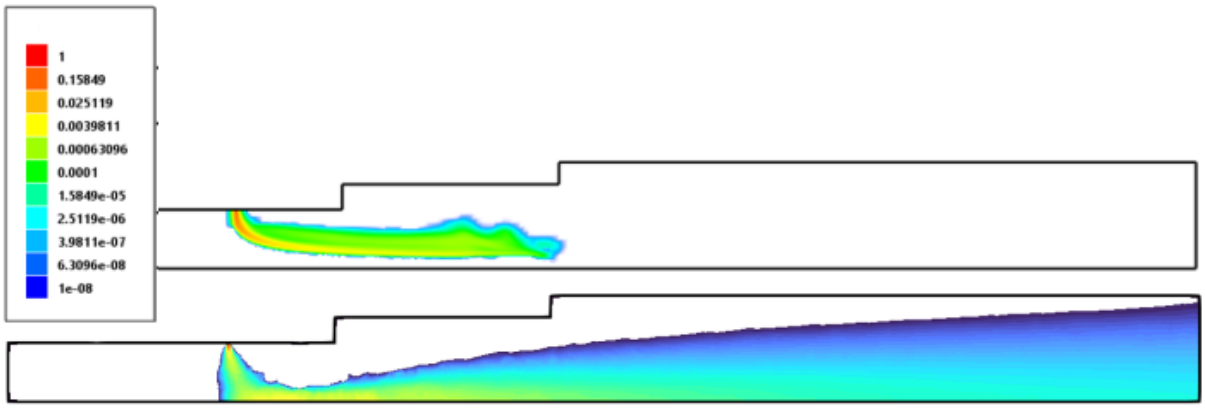


Рис. 13. Распределения объёмных долей исходного сырья в продольном сечении: верхняя часть — результат из [19]; нижняя часть — результат настоящей работы

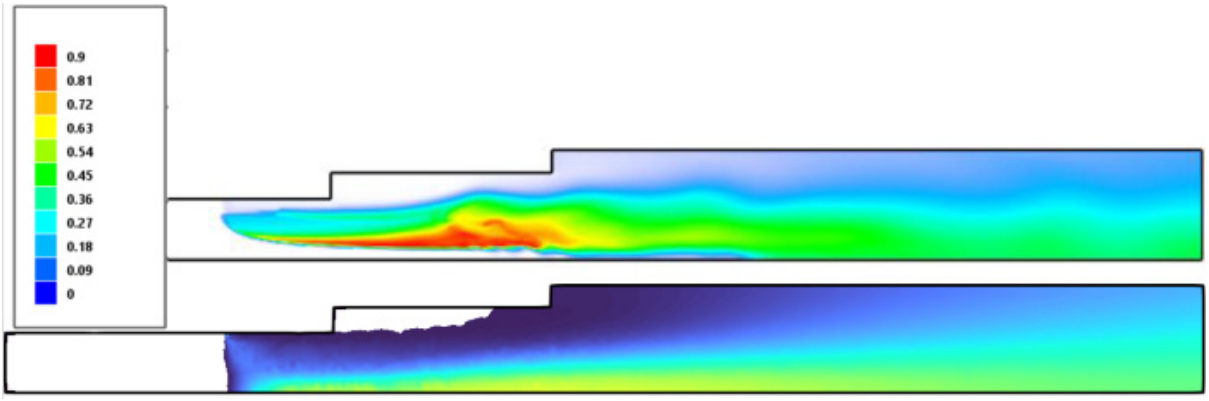


Рис. 14. Распределения массовой доли испарённого исходного сырья в продольном сечении: верхняя часть — результат из [19]; нижняя часть — результат настоящей работы

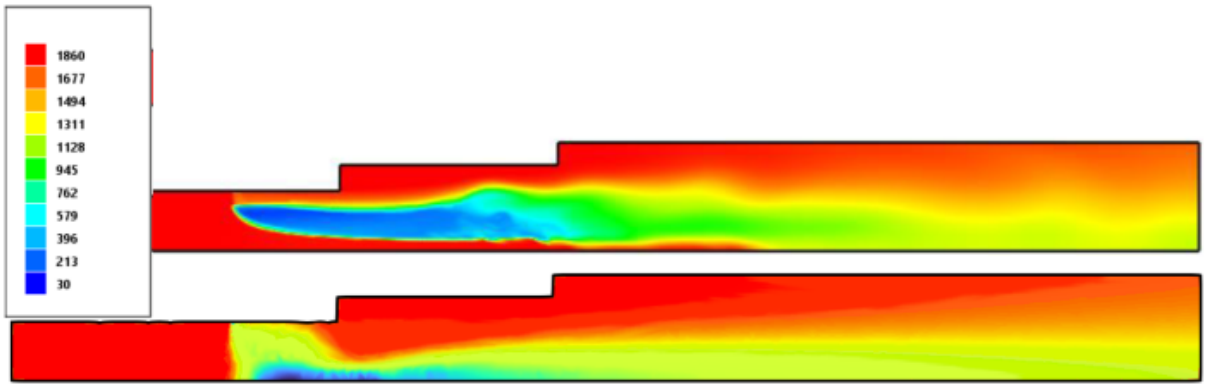


Рис. 15. Распределения температуры газа в продольном сечении:
верхняя часть — результат из [19]; нижняя часть — результат настоящей работы

При визуализации распределения объёмной доли сырья области, в которых её значения были меньше величины 0,1% не раскрашивались. Зона максимальной массовой доли пара наблюдается вблизи области концентрации сырья. Из распределения температуры газа видно, что максимальная температура газа 1860° C наблюдается на входе реактора, средняя температура 990° C имеет место быть на выходе. Минимальные значения около 30° C соответствуют области основной струи сырья с максимальным содержанием его пара. Степень испарения сырья, рассчитанная по изменению его массового расхода на входе и выходе, составляет 64% в обоих сопоставляемых расчётах.

3.1.6. Поиск входных параметров задачи распыла и испарения сырья в реакторе, оказывающих значительное влияние на её решение. Степень испарения сырья в реакторе $Z_1 = \dfrac{m_1 - m_2}{m_1}$, где m_1 — массовый расход сырья на форсунке, m_2 — массовый расход сырья на выходе из реактора и масса неиспарившегося сырья в тонком слое области реактора в окрестности его стенки Z_2 являются важнейшими характеристиками работы реактора.

Контроль за степенью испарения Z_1 необходим для недопущения наличия неиспарившихся жидких капель сырья после начала пиролиза — при высокой температуре они превратятся в кокс, загрязняющий технический углерод. Осевшее на стенках реактора неиспарившееся сырьё также превращается в загрязняющее технический углерод кокс. Минимизация функции Z_2 будет обуславливать нулевой контакт неиспарившегося сырья со стенкой реактора.

В связи со значимостью этих функций для решаемых оптимизационных задач на рис. 16–19 рассмотрены зависимости функционала Z_1.

На рис. 20–23 зависимости функционала Z_2 от входных параметров задачи: скорости подачи сырья через форсунку y_1; скорости подачи в реактор газа-теплоносителя y_2; температуре подаваемого сырья y_3; температуре подаваемого газа-теплоносителя y_4.

Из приведённых на этих рисунках зависимостей следует, что четыре рассмотренных входных параметра $\mathbf{Y} = (y_1, \ldots, y_4)$ из множества $N > 4$ всех входных параметров прямой задачи $\mathbf{X} = (x_1, \ldots, x_n)$ оказывают наибольшее влияние на степень испарения сырья Z_1 и на массу неиспарившегося сырья в тонком слое у стенки реактора Z_2.

Поэтому в работе ставятся и решаются обратные двухцелевые оптимизационные задачи распыла и испарения сырья в реакторе, в которых в качестве целевых функционалов берутся функции Z_1 и Z_2, а в качестве индивидуума в ГА – вектор $\mathbf{Y} = (y_1, \ldots, y_4)$.

Заданы следующие границы диапазонов варьирования входных параметров:

$$\begin{gathered} 20\,\text{м/с} \leqslant y_1 \leqslant 35\,\text{м/с}, \quad 350\,\text{м/с} \leqslant y_2 \leqslant 500\,\text{м/с}, \\ 15^\circ\,\text{C} \leqslant y_3 \leqslant 40^\circ\,\text{C}, \quad 1500^\circ\,\text{C} \leqslant y_4 \leqslant 2250^\circ\,\text{C}. \end{gathered} \tag{13}$$

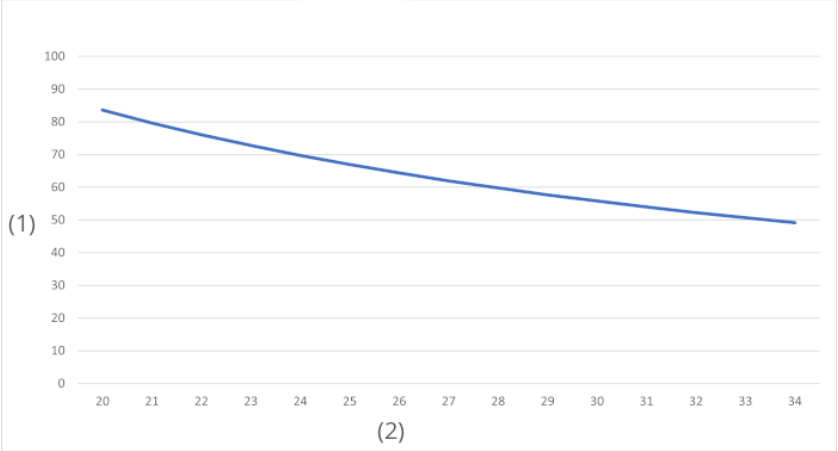


Рис. 16. Ось (1) — степень испарения $Z_1(\%)$,
ось (2) — скорость исходного сырья на сопле y_1 (м/с)
($y_2 = 422$ м/с, $y_3 = 30°$C, $y_4 = 1860°$C)

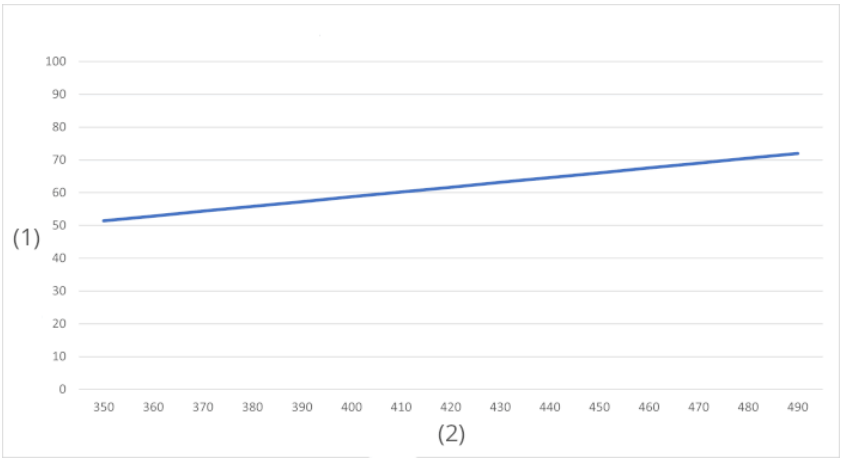


Рис. 17. Ось (1) — степень испарения $Z_1(\%)$,
ось (2) — скорость газа-носителя на входе в реактор y_2 (м/с)
($y_1 = 27$ м/с; $y_3 = 30°$C, $y_4 = 1860°$C)

Также, рассмотрим задачи МО, среди критериев оптимизации в которых будут, в том числе, максимизации скорости подачи сырья на форсунке Z_3, среднего по площади выходного сечения реактора значения объёмной доли сырья Z_4, средней по площади выходного сечения осевой составляющей скорости сырья Z_5, среднего по площади выходного сечения значения объёмной доли несущей фазы Z_6.

3.2. Результаты расчётов обратных задач

Все рассмотренные в данном разделе оптимизационные задачи решались при фазовых ограничениях (13).

3.2.1. Одновременная максимизация степени испарения сырья Z_1 в реакторе и минимизация массы сырья, контактирующего со стенкой реактора Z_2. Цели оптимизации не являются противоречивыми (конфликтующими) и достигаются в одной точке множества альтернатив. Фронт Парето — точка, сходимость которой с ростом поколений показана на рис. 24. Индивидуум, на котором в 100-м поколении наилучшим образом удовлетворены обе цели ($Z_1 = 100\%$, $Z_2 = 0.0025$ кг), имеет следующие компоненты: (y_1, y_2, y_3, y_4) = (20 м/с, 500 м/с, 40°C, 2250°C).

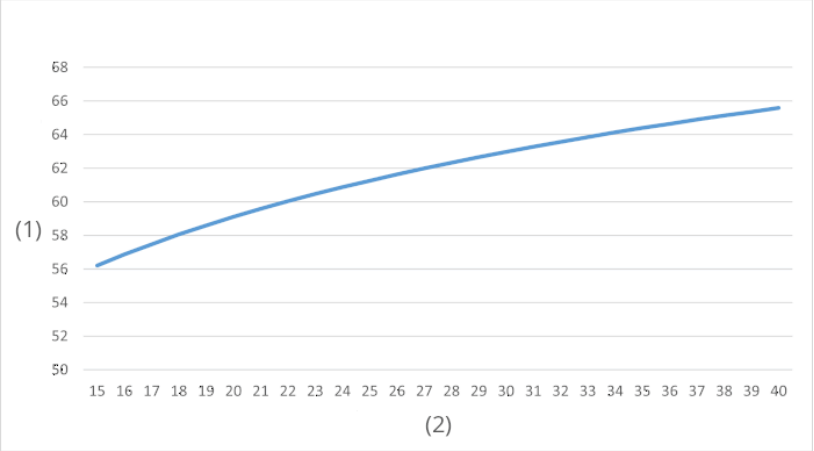


Рис. 18. Ось (1) — степень испарения $Z_1(\%)$,
ось (2) — температура исходного сырья на сопле y_3 (K)
($y_1 = 27$ м/с; $y_2 = 422$ м/с; $y_4 = 1860°$C)

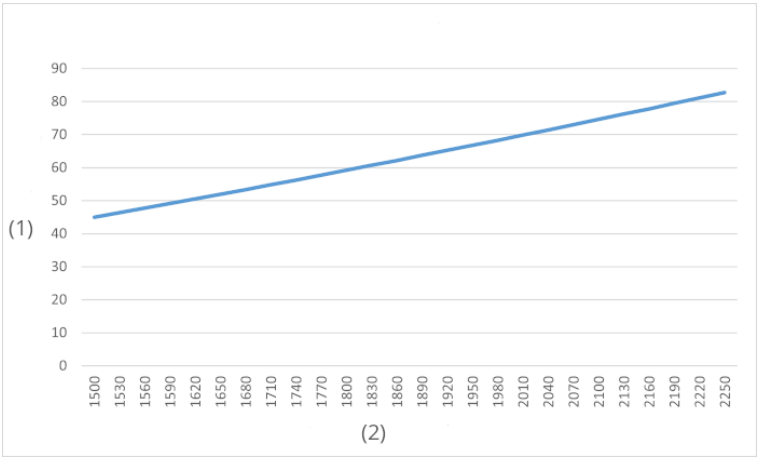


Рис. 19. Ось (1) — степень испарения $Z_1(\%)$,
ось (2) — температура газа-носителя на входе в реактор y_4 (K)
($y_1 = 27$ м/с; $y_2 = 422$ м/с; $y_3 = 30°$C)

3.2.2. Максимизация степени испарения сырья Z_1 в реакторе и максимизация скорости подачи сырья Z_3. Решая сформулированную в заголовке раздела 4.2.2 двухцелевую оптимизационную задачу, стремимся найти режим работы реактора, при котором достигаются максимальная степень испарения Z_1 и максимальная скорость сырья Z_3. на форсунке. Цели этой одновременной оптимизации предстают конфликтующими и решением данной задачи является набор оптимальных по Парето решений – кривая в плоскости переменных Z_1 и Z_3. На рис. 25 приведена сходимость с ростом поколений фронта Парето к предельному его положению.

Левый край предельного фронта — индивидуум (y_1, y_2, y_3, y_4) = (20 м/с, 500 м/с, 40°C, 2250°C) наилучшим образом удовлетворяет первую цель ($Z_1 = 100\%$). Но при этом индивидууме целевая функция $Z_3 = 20$ м/с.

Правый край предельного фронта – индивидуум (y_1, y_2, y_3, y_4) = (35 м/с, 500 м/с, 40°C, 2250°C) наилучшим образом удовлетворяет вторую цель ($Z_3 = 35$ м/с). Но значение первой целевой функции при этом индивидууме $Z_1 = 81\%$.

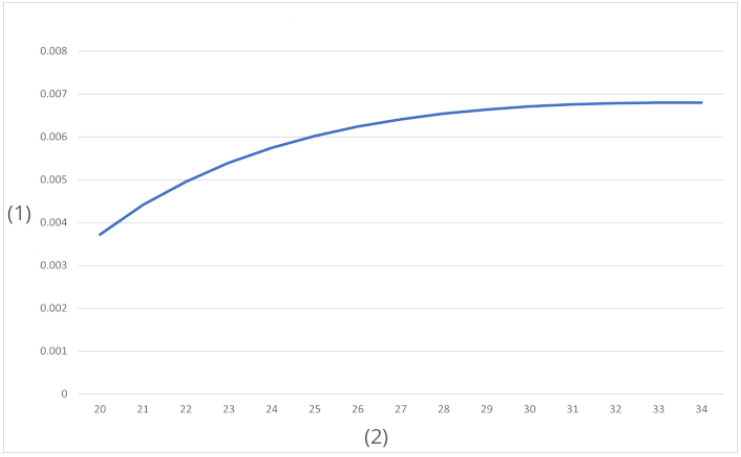


Рис. 20. Ось (1) — масса неиспарившегося исходного сырья в тонком слое у стенки реактора Z2(%), ось (2) — скорость исходного сырья на сопле y_1 (м/с) ($y_2 = 422$ м/с; $y_3 = 30°$C; $y_4 = 1860°$C)

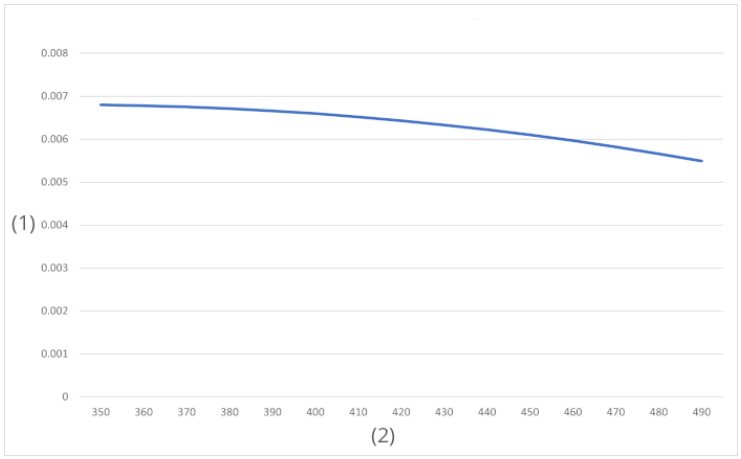


Рис. 21. Ось (1) — масса неиспарившегося исходного сырья в тонком слое у стенки реактора $Z_2(\%)$, ось (2) — скорость газа-носителя (2) на входе в реактор y_2 (м/с) ($y_1 = 27$ м/с; $y_3 = 30°$C; $y_4 = 1860°$C)

3.2.3. Максимизация степени испарения сырья Z_1 в реакторе и максимизация средней по площади выходного сечения реактора значения объёмной доли сырья Z_4. Находим режим работы реактора, при котором достигаются максимальная степень испарения сырья Z_1 и максимальное среднее по площади выходного сечения реактора значение объёмной доли сырья Z_4. Цели этой одновременной оптимизации очевидно предстают конфликтующими и решением данной задачи является набор оптимальных по Парето решений — кривая в плоскости переменных Z_1 и Z_4. На рис. 26 приведена сходимость фронта Парето с ростом поколений к предельному его положению.

Левый край предельного фронта — индивидуум (y_1, y_2, y_3, y_4) = (20 м/с, 500 м/с, 40°C, 2250°C) наилучшим образом удовлетворяет первую цель ($Z_1 = 100\%$). Но при этом индивидууме целевая функция $Z_4 = 0$.

Правый край предельного фронта — индивидуум (y_1, y_2, y_3, y_4) = (35 м/с, 350 м/с, 15°C, 1500°C) наилучшим образом удовлетворяет вторую цель ($Z_4 = 0.005$). Но значение первой целевой функции при этом индивидууме $Z_1 = 60\%$.

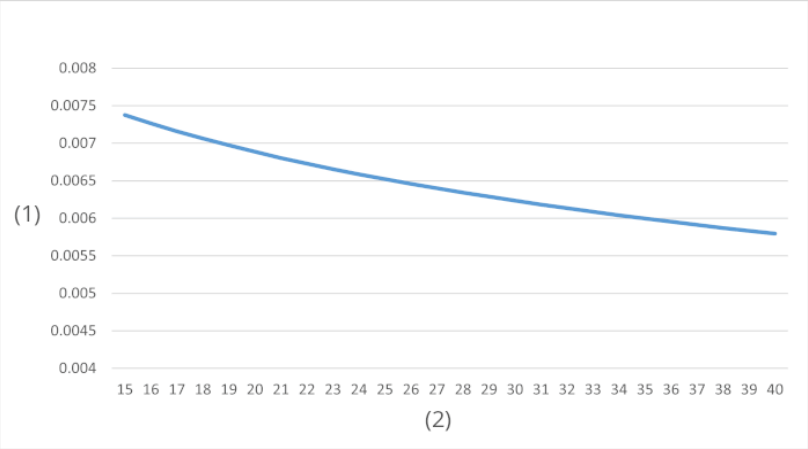


Рис. 22. Ось (1) — масса неиспарившегося исходного сырья в тонком слое у стенки реактора $Z_2(\%)$, ось (2) — температура исходного сырья (2) на сопле y_3 (K) ($y_1 = 27$ м/с; $y_2 = 422$ м/с; $y_4 = 1860°$C)

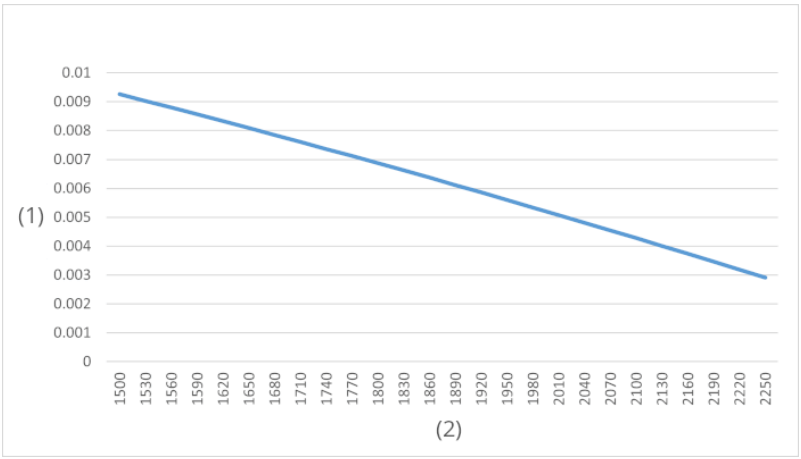


Рис. 23. Ось (1) — масса неиспарившегося исходного сырья в тонком слое у стенки реактора $Z_2(\%)$ ось (2) — температура газа-носителя (2) на входе в реактор y_4 (K) ($y_1 = 27$ м/с; $y_2 = 422$ м/с; $y_3 = 30°$C)

3.2.4. Максимизация степени испарения сырья Z_1 в реакторе и максимизация средней по площади выходного сечения реактора значения осевой составляющей скорости сырья Z_5. Ищем режим работы реактора, при котором достигаются максимальная степень испарения сырья Z_1 и максимальное среднее по площади выходного сечения реактора значение осевой составляющей скорости сырья Z_5. Цели этой одновременной оптимизации также предстают конфликтующими и решением данной задачи является набор оптимальных по Парето решений — кривая в плоскости переменных Z_1 и Z_5. На рис. 27 приведена сходимость фронта Парето с ростом поколений к предельному его положению.

Левый край предельного фронта — индивидуум (y_1, y_2, y_3, y_4) = (20 м/с, 500 м/с, 40°C, 2250°C) наилучшим образом удовлетворяет первую цель ($Z_1 = 100\%$). Но при этом индивидууме целевая функция $Z_5 = 76$ м/с. Правый край предельного фронта — индивидуум (y_1, y_2, y_3, y_4) = (29 м/с, 500 м/с, 40°C, 2250°C) наилучшим образом удовлетворяет вторую цель ($Z_5 = 76.6$ м/с). Но значение первой целевой функции при этом индивидууме $Z_1 = 85.2\%$.

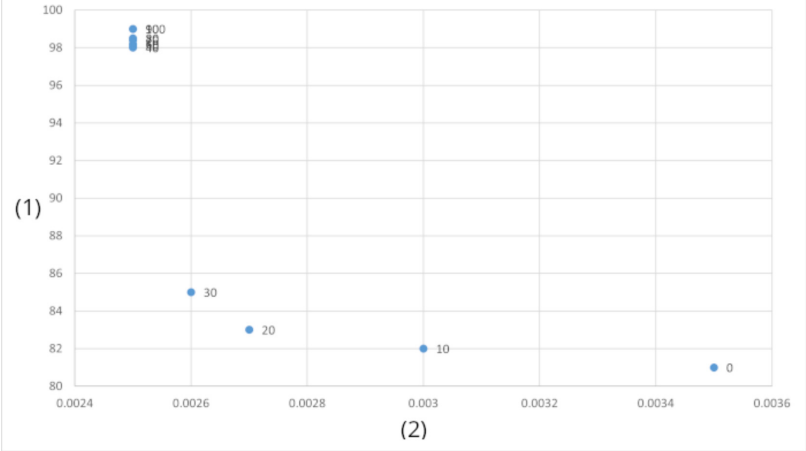


Рис. 24. Сходимость фронта Парето с увеличением поколений в задаче оптимизации $\max Z_1, \min Z_2$:
(1) — $Z_1(\%)$ степень испарения; (2) — Z_2 (кг) масса жидкости у стенки

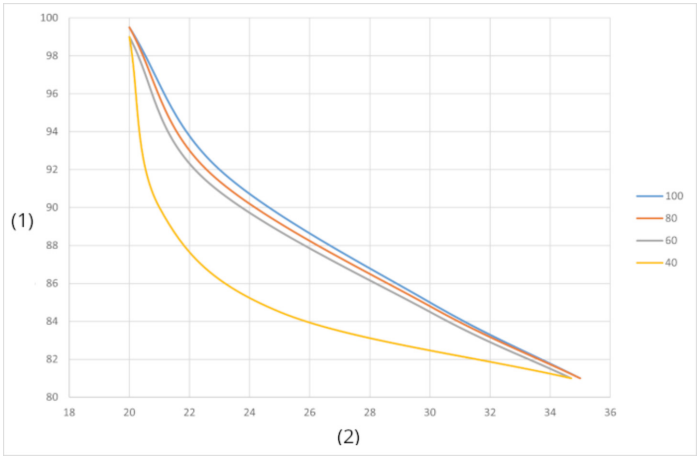


Рис. 25. Сходимость фронта Парето с увеличением поколений в задаче оптимизации $\max Z_1, \max Z_3$:
(1) — $Z_1(\%)$ степень испарения; (2) — $Z_3(\mathrm{m/s})$ скорость подачи сырья

3.2.5. Максимизация среднего по выходному сечению реактора значения объёмной доли сырья Z_4 и максимизация среднего по площади выходного сечения значения объёмной доли несущей фазы Z_6.

Максимизируем среднее по выходному сечению реактора значение объёмной доли сырья Z_4 и среднее по площади выходного сечения значения объёмной доли несущей фазы Z_6. На рис. 28 приведена сходимость фронта Парето с ростом поколений к предельному его положению.

Левый край предельного фронта – индивидуум (y_1, y_2, y_3, y_4) = (35 м/с, 350 м/с, 15°C, 1500°C) наилучшим образом удовлетворяет первую цель ($Z_4 = 0.005$). Но при этом индивидууме целевая функция $Z_6 = 0.995$. Правый край предельного фронта – индивидуум (y_1, y_2, y_3, y_4) = (20 м/с, 500 м/с, 40°C, 2250°C) наилучшим образом удовлетворяет вторую цель ($Z_6 = 1$). Но значение первой целевой функции при этом индивидууме $Z_4 = 0$.

3.3. Обсуждение результатов решения обратных задач

В задаче $\max\limits_{\mathbf{Y}} Z_1, \min\limits_{\mathbf{Y}} Z_2$ максимальное значение $Z_1 = 100\%$, и минимальное значение $Z_2 = 0,0025$ кг достигаются на индивидууме $(20, 500, 40, 2250)$, у которого скорость подачи

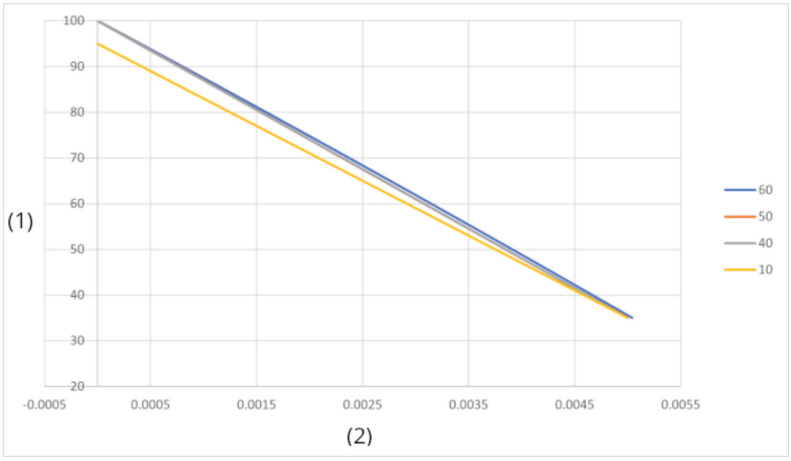


Рис. 26. Сходимость фронта Парето с увеличением поколений в задаче оптимизации $\max Z_1, \max Z_4$: (1) — $Z_1(\%)$ степень испарения; (2) — Z_4 м/с средняя по площади выходного сечения реактора значения объемной доли сырья

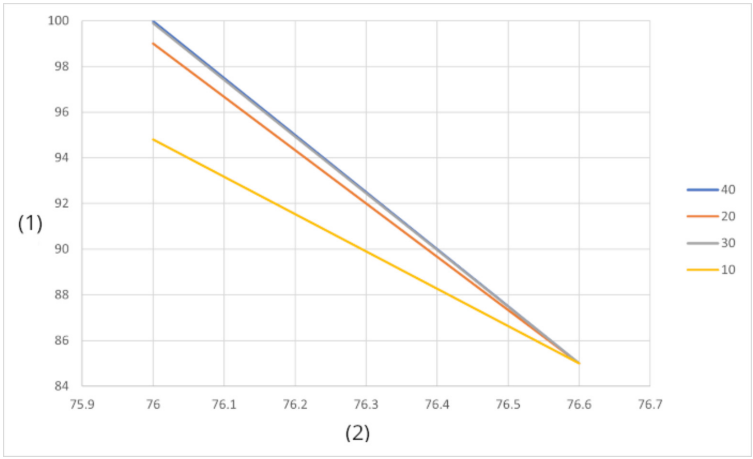


Рис. 27. Сходимость фронта Парето с увеличением поколений в задаче оптимизации $\max Z_1, \max Z_5$: (1) — $Z_1(\%)$ степень испарения; (2) — $Z_5(\mathrm{m/s})$ средняя по площади выходного сечения реактора значения осевой составляющей скорости сырья

сырья на форсунке y_1 приняла значение нижней границы диапазона её варьирования. Остальные компоненты индивидуума совпали с верхними границами диапазонов их варьирования [13]. Полученный результат согласуется с данными анализа чувствительности решения задачи к входным параметрам: для Z_1 это видно из рис.16–19, а для Z_2 — из рис. 20–23.

Из зависимости Z_1 от y_1, приведённой на рис. 16, предсказуемо смотрится решение задачи $\max\limits_{\mathbf{Y}} Z_1, \max\limits_{\mathbf{Y}} Z_3$ Но, что важно. Если на указанной зависимости при максимальном значении $y_1 = 35$ м/с величина Z_1 равна около 50%, то оптимизационный алгоритм подобрал значения остальных параметров индивидуума y_2, y_3, y_4 такими, что величина Z_1 стала равна 81%.

Во всех задачах, кроме $\max\limits_{\mathbf{Y}} Z_1, \max\limits_{\mathbf{Y}} Z_5$, на краях найденных фронтов Парето индивидуумы имеют компоненты, совпадающие со значениями границ диапазонов варьирования этих компонент.

В двухцелевой задаче $\max\limits_{\mathbf{Y}} Z_1, \max\limits_{\mathbf{Y}} Z_5$, первая цель которой максимизация степени испарения сырья Z_1, а вторая — максимизация среднего по площади выходного сечения реактора

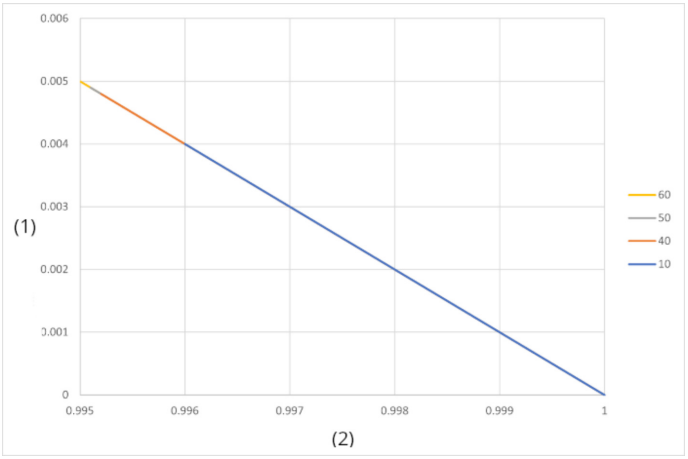


Рис. 28. Сходимость фронта Парето к его предельному положению с увеличением поколений в задаче оптимизации $\max Z_4, \max Z_6$:
(1) — Z_4 (м/с) средняя по площади выходного сечения реактора значения объемной доли сырья;
(2) — Z_6 (м/с) средняя по площади выходного сечения значения объемной доли несущей фазы

значения осевой составляющей скорости сырья Z_5, индивидуум на правом краю предельного фронта Парето (y_1, y_2, y_3, y_4) = (29 м/с, 500 м/с, 40°C, 2250°C). Его первая компонента — скорость подачи сырья на форсунке y_1 имеет значение, далёкое как от нижней (20 м/с), так и от верхней (35 м/с) границ диапазона её варьирования. Остальные компоненты индивидуума совпали с верхними границами диапазонов их варьирования [13]. Это свидетельствует о работоспособности ГА осуществлять поиск глобальных экстремумов многоцелевых оптимизационных задач. Тем самым, можно констатировать, что предложенный оптимизационный метод решения трёхмерных обратных задач моделирования процесса распыла и испарения жидкого углеводородного сырья в реакторе печного производства технического углерода опробован на ряде задач со сложными целевыми функциями и показал свою пригодность для их решения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе методов математического моделирования предлагается аппарат оптимизационного проектирования технологии процесса производства технического углерода. Решения многокритериальных оптимизационных задач трёхмерного моделирования процесса распыла и испарения жидкого углеводородного сырья в реакторе дают регламент работы реактора, при котором достигаются наибольшие дисперсность и структурность технического углерода при минимальном его загрязнении коксом и в то же время при достаточно высоком выходе продукта. Целевые функции определяются по численному решению прямой задачи распыла и испарения сырья. В них учитывается имеющаяся теоретическая и эмпирическая информация о влиянии параметров углеводородов в реакционной зоне на дисперсность и структурность технического углерода. Оптимизационная задача решается с помощью генетического метода. Результаты проведённых ряда численных экспериментов представлены в статье. В качестве целевых функций в решённых задачах МО рассмотрены степень испарения сырья в реакторе Z_1, масса неиспарившегося сырья в тонком слое у стенки реактора Z_2. Тонкий слой — это один слой ячеек сетки на стенке второго и третьего цилиндров. Контроль за степенью испарения Z_1 необходим для недопущения наличия неиспарившихся жидких капель сырья после начала пиролиза — при высокой температуре они превратятся в кокс, загрязняющий технический углерод. Минимизация функции Z_2 обуславливает нулевой контакт неиспарившегося сырья со стенкой реактора, в результате которого образуется кокс, загрязняющий продукт. Также,

рассмотрены задачи МО, среди целей которых ставились, в том числе, максимизации скорости подачи сырья на форсунке Z_3, среднего по площади выходного сечения реактора значения объёмной доли сырья Z_4, средней по площади выходного сечения осевой составляющей скорости сырья Z_5, среднего по площади выходного сечения значения объёмной доли несущей фазы Z_6. В качестве варьируемых параметров в задачах МО задавались скорость подачи сырья через форсунку y_1, скорость подачи в реактор газа-теплоносителя y_2, температура подаваемого сырья y_3, температура подаваемого газа-теплоносителя y_4, т. е. индивидуумом в ГА был вектор $\mathbf{Y} = (y_1, \ldots, y_4)$.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Исследования выполнены в рамках государственного задания Института теплофизики им. С. С. Кутателадзе СО РАН (проект 125031904210-0). 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. *Ansys* Ansys Fluent (Version 2023). Canonsburg, PA: Ansys, Inc., 2023.
2. *Черный С.Г., Чирков Д.В., Лапин В.Н., Скороспелов В.А., Шаров С.В.* Численное моделирование течений в турбомашинах. Новосибирск: Наука, 2006.
3. *Гюльмисарян Т.Г., Капустин В.М., Левенберг И.П.* Технический углерод: морфология, свойства, производство. М.: Издательство Каучук и резина, 2017.
4. *Орлов В.Ю., Комаров А.М., Ляпина Л.А.* Производство и использование технического углерода для резин. Ярославль: Издательство Александр Рутман, 2002.
5. *Schiller L., Naumann Z.* A drag coefficient correlation // Verein Deutscher Ingenieure. 1935. V. 77. P. 318.
6. *Ranz W.E., Marshall W.R.* Vaporation from Drops, Part I // Chem. Eng. Prog. 1952. V. 48, N 3. P. 141–146.
7. *Ranz W.E., Marshall W.R.* Vaporation from Drops, Part II // Chem. Eng. Prog. 1952. V. 48, N 4. P. 173–180.
8. *Lee W.H.* A Pressure Iteration Scheme for Two-Phase Flow Modeling (LA-UR 79-975). Los Alamos, NM: Los Alamos Scientific Laboratory, 1979.
9. *Whitman W.G.* The two-film theory of gas absorption // Chem. Met. Eng. 1923. V. 29. P. 146.
10. *Черный С.Г., Тарраф Д.* Об особенностях моделирования распада струи жидкости на капли в потоке газа // Вестн. НГУ. Сер.: Информационные технологии. 2025. Т. 23, N 1. С. 67–87; DOI: 10.25205/1818-7900-2025-23-1-67-87
11. *Сипатов А.М., Карабасов С.А., Гомзиков Л.Ю., Абрамчук Т.В., Семаков Г.Н.* Моделирование процесса распыла с использованием адаптивных сеточных моделей // Вычислительная механика сплошных сред. 2015. Т. 8, No 1. С. 93–101.
12. *Wu P.K., Kirkendall K.A., Fuller R.P., Nejad A.S.* Spray structures of liquid jets atomized in subsonic crossflows // J. Propul. Power. 1998. V. 14, N 2. P. 173–182; DOI: 10.2514/2.5283
13. *Brandt M., Rachner M., Schmitz G.* An experimental and numerical study of kerosine spray evaporation in a premix duct for gas turbine combustors at high pressure // Combustion Sci. Techn. 1998. V. 138, N 1. P. 313–348; DOI: 10.1080/00102209808952074
14. *Volkov R.S., Kuznetsov G.V., Strizhak P.A.* Influence of droplet concentration on evaporation in a high-temperature gas // Int. J. Heat and Mass Transfer. 2016. V. 96. P. 20–28.

15. *Cherny S.G., Zeziulin I.V., Tarraf D., Pochuev A.P., Boronenko I.S.* The direct and inverse problems of modeling the carbon black furnace production process // Euras. J. Math. Comput. Appl. 2025. V. 13, N 2. P. 13–42; DOI: 10.32523/2306-6172-2025-13-2-13-42

16. *Fonseca C.M., Fleming P.J.* Genetic algorithms for multiobjective optimization formulation, discussion and generalization // Proc. 5th Int. Conf. on Genetic Algorithms. 1993.

17. *Horn J., Nafpliotis N.* Multiobjective Optimization Using The Niched Pareto Genetic Algorithm (IlliGAL Report 93005). Urbana: University of Illinois, 1993.

18. *Goldberg D.E., Richardson J.J.* Genetic algorithms with sharing for multimodal function optimization // Proc. 2nd ICGA. 1987.

19. *Aksenov A.A., Zhluktov S.V., Kashirin V.S., Sazonova M.L., Cherny S.G., Drozdova E.A., Rode A.A.* Numerical simulation in the flowvision software of spraying and evaporation of feedstock in a heat-carrier gas flow in the furnace production of technical carbon // Comput. Research and Modeling. 2023. V. 15, N 4. P. 921–939; DOI: 10.20537/2076-7633-2023-15-4-921-939

UDC 621.45:034.3

OPTIMIZATION DESIGN OF CARBON BLACK PRODUCTION TECHNOLOGY

© 2026 **S. G. Cherny**[1a], **D. Tarraf**[2b]

[1] *Kutateladze Institute of Thermophysics SB RAS, Acad. Lavrentyev ave., 1, Novosibirsk 1630090, Russia,*
[2] *Novosibirsk State University, Pirogov st., 2, Novosibirsk 630090, Russia*

E-mails: [a]sgcherny2023@yandex.ru, [b]daniel.tarraf.93@gmail.com

Received 12.09.2025, revised 26.12.2025, accepted 13.05.2026

Abstract. This study formulates and solves multi-objective optimization problems related to modeling the spray and evaporation processes of liquid hydrocarbon feedstock in a furnace reactor used for carbon black production. The solutions define reactor operating conditions that maximize the dispersion and structural integrity of carbon black while minimizing contamination with coke and maintaining a sufficiently high product yield. Objective functions are derived from numerical solutions to the direct problem of spray and evaporation, based on a three-dimensional Eulerian model within the Euler–Euler framework for multiphase flow simulation in ANSYS. These functions incorporate both theoretical and empirical data on how hydrocarbon parameters in the reaction zone affect the dispersion and structure of carbon black. A key relationship is considered: the higher the hydrocarbon concentration in the reaction zone, the greater the structural integrity of the carbon black. One proposed objective function is the coagulation parameter of structure formation, ?, which accounts for the concentration, average diameter, and average charge of carbon black particles prior to coagulation. As ? increases, the structural integrity of the particles improves. Another objective function considered is the mean deviation of droplet sizes. Besides process temperature and initial hydrocarbon concentration, the number of aromatic rings in the average feedstock molecule also affects particle concentration and diameter before coagulation. An increase in aromatic rings leads to higher structural integrity of carbon black. The constructed objective functions also incorporate mechanisms for achieving the desired spray fineness, uniform droplet distribution, complete evaporation of feedstock, and prevention of contact between un-evaporated feedstock and the reactor lining (walls), as such contact leads to coke formation. To reach the extrema of these functionals, the velocity and temperature of the carrier gas at the reactor inlet, as well as the velocity and temperature of the injected feedstock, are varied. The optimization problem is solved using a genetic algorithm. Results of the numerical experiments are presented in the article.

Keywords: carbon black, inverse problem of spray and evaporation process in pyrolysis reactor for carbon black production.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.309

REFERENCES

1. Ansys Ansys Fluent (Version 2023). Canonsburg, PA: Ansys, Inc., 2023.
2. Cherny S. G., Chirkov D. V., Lapin V. N., et al. Chislennoe modelirovanie techenij v turbomashinah [Numerical modeling of flows in turbomachines]. Novosibirsk: Nauka, 2006 (in Russian).
3. Gulmisaryan T.G., Kapustin V.M., Levenberg I.P. Tehnicheskij uglerod: morfologiya, svojstva, proizvodstvo [Technical carbon: morphology, properties, production]. Moscow: Kauchuk i Rezina Publ., 2017 (in Russian).

English translation is published in Journal of Applied and Industrial Mathematics, 2026, Vol. 20, No. 3.

4. Orlov V. Yu., Komarov A. M., Lyapina L. A. Proizvodstvo i ispol'zovanie tehnicheskogo ugleroda dlya rezin. [Production and use of technical carbon for rubbers]. Yaroslavl: Aleksandr Rutman Publ., 2002 (in Russian).
5. Schiller L., Naumann Z. A drag coefficient correlation. *Verein Deutscher Ingenieure*, 1935, Vol. 77, pp. 318.
6. Ranz W.E., Marshall W.R. Vaporation from Drops, Part I. *Chem. Eng. Prog.*, 1952, Vol. 48, No. 3, pp. 141–146.
7. Ranz W.E., Marshall W.R. Vaporation from Drops, Part II. *Chem. Eng. Prog.*, 1952, Vol. 48, No. 4, pp. 173–180.
8. Lee W. H. A Pressure Iteration Scheme for Two-Phase Flow Modeling (LA-UR 79-975). Los Alamos, NM: Los Alamos Scientific Laboratory, 1979.
9. Whitman W.G. The two-film theory of gas absorption. *Chem. Met. Eng.*, 1923, Vol. 29, pp. 146.
10. Cherny S.G., Tarraf D. Ob osobennostyah modelirovaniya raspada strui zhidkosti na kapli v potoke gaza [On the Features of Modeling Liquid Jet Breakup into Droplets in a Gas Flow]. *Bulletin of NSU. Series: Information Technologies*, 2025, Vol. 23, No. 1, pp. 67–87 (in Russian); DOI: 10.25205/1818-7900-2025-23-1-67-87
11. Sipatov A.M., Karabasov S.A., Gomzikov L.Yu., Abramchuk T.V., Semakov G. N. Modelirovanie processa raspyla s ispol'zovaniem adaptivnyh setochnyh modelej [Modeling of the Spray Process Using Adaptive Grid Models]. *Vychislitel'naya Mehanika Sploshnyh Sred* [Comput. Mech. Continuous Media], 2015. Vol. 8, No. 1, pp. 93–101 (in Russian); DOI: 10.7242/1999-6691/2015.8.1.8
12. Wu P.K., Kirkendall K.A., Fuller R.P., Nejad A.S. Spray structures of liquid jets atomized in subsonic crossflows // *J. Propul. Power*, 1998, Vol. 14, No. 2, pp. 173–182; DOI: 10.2514/2.5283
13. Brandt M., Rachner M., Schmitz G. An experimental and numerical study of kerosine spray evaporation in a premix duct for gas turbine combustors at high pressure. *Combustion Sci. Techn.*, 1998, Vol. 138, No. 1, pp. 313–348; DOI: 10.1080/00102209808952074
14. Volkov R.S., Kuznetsov G.V., Strizhak P.A. Influence of droplet concentration on evaporation in a high-temperature gas. *Int. J. Heat and Mass Transfer*, 2016, Vol. 96, pp. 20–28.
15. Cherny S.G., Zeziulin I.V., Tarraf D., Pochuev A.P., Boronenko I.S. The direct and inverse problems of modeling the carbon black furnace production process. *Euras. J. Math. Comput. Appl.*, 2025, Vol. 13, No. 2, pp. 13–42; DOI: 10.32523/2306-6172-2025-13-2-13-42
16. Fonseca C.M., Fleming P.J. Genetic algorithms for multiobjective optimization formulation, discussion and generalization. *Proc. 5th Int. Conf. on Genetic Algorithms*, 1993.
17. Horn J., Nafpliotis N. Multiobjective Optimization Using The Niched Pareto Genetic Algorithm (IlliGAL Report 93005). Urbana: University of Illinois, 1993.
18. Goldberg D.E., Richardson J.J. Genetic algorithms with sharing for multimodal function optimization. *Proc. 2nd ICGA*, 1987.
19. Aksenov A.A., Zhluktov S.V., Kashirin V.S., Sazonova M.L., Cherny S.G., Drozdova E.A., Rode A.A. Numerical simulation in the flowvision software of spraying and evaporation of feedstock in a heat-carrier gas flow in the furnace production of technical carbon. *Comput. Research and Modeling*, 2023, Vol. 15, No. 4, pp. 921–939; DOI: 10.20537/2076-7633-2023-15-4-921-939

УДК 532.584

ВИХРЕВЫЕ СТРУКТУРЫ ПРИ СЕДИМЕНТАЦИИ ЧАСТИЦ В НАКЛОННОМ СОСУДЕ

© 2026 В. В. Шелухин[a], В. В. Неверов[b]

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

E-mails: [a]shelukhin@hydro.nsc.ru, [b]neverovvladim@gmail.com

Поступила в редакцию 04.02.2026 г.; после доработки 04.02.2026 г.; принята к публикации 16.09.2026 г.

В рамках термодинамики двухскоростного континуума сформулирована математическая модель седиментации твёрдых частиц в суспензиях. Численные результаты согласуются с бенчмарк экспериментом Бойкотта, согласно которому седиментация происходит интенсивнее в наклонённом сосуде. С помощью трёхмерных расчётов доказано, что осаждение частиц в круглой трубе определяется вихрями. В частности, установлено, что поперечная миграция частиц вызвана циркуляциями типа Ленгмюра, которые отсутствуют в «двумерных» сосудах.

Ключевые слова: суспензии, седиментация, вихри.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.310

ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе обсуждается математическая модель, которая описывает циркуляции типа Ленгмюра при 3D-седиментации суспензий в наклонной круглой трубе. Что касается вертикального сосуда, то в недавней работе авторов [1] установлено, что в соответствующих 2D-течениях подобные вихри отсутствуют.

Впервые указанные циркуляции наблюдались непосредственно под поверхностью океана как «валы» — почти параллельные линии пены или обломков, скапливающиеся в нисходящих областях между вихрями [2]. Согласно теории Крейка-Лейбовича [3], это явление вызвано взаимодействием подповерхностных сдвиговых течений и плоских волн, генерируемых ветром под косым углом к поверхности. В нашем случае поверхность океана заменена плоскостью, перпендикулярной плоскости симметрии, а косой угол — наклоном трубы. Мы показываем, что для круглой трубы механизм циркуляции определяется силой тяжести.

Прогресс в изучении явления Лангмюра применительно к поверхности водоёмов всесторонне представлен в обзорах [4, 5]. Гораздо меньше известно о вихрях в трубных течениях. В работе [6] циркуляции типа Ленгмюра обнаружены во «вторичном течении» в трубах, где первичный поток представляет собой поток типа Пуазейля; при этом шероховатость стенки должна быть структурированной, например, в виде «яичного лотка».

Ещё одна особенность наклонных трубок связана с эффектом Бойкотта [7], согласно которому осаждение частиц в наклонном сосуде происходит интенсивнее, чем в вертикальном. В работах [8, 1] такой эффект был объяснён для двумерной трубы. При проведении здесь трёхмерных расчётов для наклонного сосуда обнаруживается, что механизмы поперечной миграции частиц в двумерных и трёхмерных трубах совершенно различны.

В настоящей работе применяется термодинамический подход Халантикова — Ландау, разработанный ими для математического описания сверхтекучести жидкости 2He [9]. Частицы

и несущая жидкость рассматриваются как различные жидкие фазы, образующие двухскоростной континуум. Законы сохранения формулируются согласованно с термодинамическими принципами и инвариантно относительно преобразований Галилея при переходе из системы отсчёта несущей жидкости в лабораторную систему отсчёта. В трёхмерном случае с помощью вычислений показано, что в каждой плоскости, проходящей через ось вертикальной трубы существуют два одинаковых макровихря, вращающихся в противоположных направлениях. Картина отличается в случае наклонной трубы. В плоскости симметрии находится один вихрь, который преобладает над вихрями, наблюдаемыми в вертикальном случае. Скорость в плоскости симметрии значительно больше, чем в вертикальном случае. Более того, в поперечных сечениях трубы обнаружены четыре вихря с чередующимися знаками. Интересно, что картина из четырёх макровихрей в поперечном сечении трубы наблюдается даже при максимальном угле наклона, т. е. в горизонтальной трубке.

Структура статьи следующая. Сначала объясняется базовая математическая модель, а затем рассматривается седиментация в наклонных трубах.

1. ТЕРМОДИНАМИКА ДВУХСКОРОСТНОГО КОНТИНУУМА

Для удобства читателей здесь приводится краткое описание математической модели, обоснованной в [1]. Формулируя двухскоростную модель для суспензионных потоков мы предполагаем, что несущая жидкость (f-фаза) представляет собой ньютоновскую вязкую жидкость со скоростью $\mathbf{v}_f$. Мы не рассматриваем сухие частицы (p-фаза) как жидкую фазу. Вместо этого сухие частицы считаются смоченными с небольшим количеством жидкого связующего (m-фаза). Такой подход позволяет нам рассматривать слабосмачиваемый гранулированный материал как гранулированную жидкую фазу (s-фаза). Обозначим скорость частиц через $\mathbf{v}_s$, предполагая, что скорости частиц и жидкого связующего одинаковы.

Обозначим через φ_k и $\bar{\rho}_k$ объёмные доли и истинные плотности соответственно ($k = f, s, m$), тогда $\rho_k = \varphi_k \bar{\rho}_k$ имеют смысл парциальных плотностей. Очевидно, $\varphi_f + \varphi_p + \varphi_m = 1$. Введём полную плотность, плотность твёрдой фазы и массовую концентрацию частиц следующим образом:

$$\rho = \rho_f + \rho_p + \rho_m, \quad \rho_s = \rho_p + \rho_m, \quad c = \rho_p/\rho.$$

Обозначим через E^0 и $\mathbf{j}^0$ внутреннюю энергию и полный импульс. Далее верхний индекс 0 относится к системе отсчёта, связанной с f-фазой. Энергия E^0 удовлетворяет тождеству Гиббса

$$dE^0 = \theta dS + \mu d\rho + \mu_p d\rho_p + \mathbf{u} \cdot d\mathbf{j}^0, \quad \mathbf{u} \equiv \mathbf{v}_s - \mathbf{v}_f, \tag{1}$$

где S — энтропия, μ и μ_p — химические потенциалы, θ — абсолютная температура.

Начнём вывод законов сохранения со случая, когда эффектами диссипации можно пренебречь. Будем искать законы сохранения в виде

$$\rho_t + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad \mathbf{j}_t + \operatorname{div} \Pi = 0, \quad S_t + \operatorname{div} \mathbf{F}_\theta = 0, \tag{2}$$

$$\rho_{st} + \operatorname{div} (\rho_s \mathbf{v}_s) = 0, \quad (\rho c)_t + \operatorname{div} \mathbf{F}_c = 0, \tag{3}$$

$$\mathbf{v}_{ft} + (\mathbf{v}_f \cdot \nabla)\mathbf{v}_f = \alpha \nabla \mu + \beta \nabla \theta + \gamma \nabla \mu_p, \tag{4}$$

$$E_t + \operatorname{div} \mathbf{Q} = 0, \tag{5}$$

где $\mathbf{j}$ — полный импульс в лабораторной системе отсчёта, Π — полный поток импульса, $\mathbf{F}_\theta$ — поток энтропии, $\mathbf{F}_c$ — поток концентрации, E — энергия, $\mathbf{Q}$ — поток энергии. Скалярные параметры α, β, γ будут определены ниже вместе с неизвестными потоками в уравнениях (2)–(5). Напомним, что вектор $\operatorname{div} \Pi$ определяется для матрицы Π по формуле $(\operatorname{div} \Pi)_i = \dfrac{\partial \Pi_{ij}}{\partial x_j}$.

Переходя в лабораторную систему отсчёта из системы отсчёта, связанную с f-фазой,

$$(E^0, \mathbf{j}^0, \mathbf{Q}^0, \Pi^0) \to (E, \mathbf{j}, \mathbf{Q}, \Pi),$$

приходим к формулам [9]

$$E = E^0 + \rho\frac{\mathbf{v}_f^2}{2} + \mathbf{v}_f \cdot \mathbf{j}^0, \quad \mathbf{j} = \mathbf{j}^0 + \rho\mathbf{v}_f, \quad \Pi = \Pi^0 + \rho\mathbf{v}_f \otimes \mathbf{v}_f + \mathbf{v}_f \otimes \mathbf{j}^0 + \mathbf{j}^0 \otimes \mathbf{v}_f, \tag{6}$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}^0 + \left(\rho\frac{\mathbf{v}_f^2}{2} + \mathbf{j}^0 \cdot \mathbf{v}_f + E^0\right)\mathbf{v}_f + \mathbf{j}^0\frac{\mathbf{v}_f^2}{2} + \Pi^0 \cdot \mathbf{v}_f. \tag{7}$$

Абсолютная температуры и химпотенциалы удовлетворяют равенствам

$$\theta = \frac{\partial E^0}{\partial S}, \quad \mu = \frac{\partial E^0}{\partial \rho}, \quad \mu_p = \frac{\partial E^0}{\partial(\rho c)}. \tag{8}$$

По своему смыслу, давление есть производная энергии по объёму. Следовательно

$$p = -E^0 + \theta S + \mu\rho + \mu_p\rho c + \mathbf{u} \cdot \mathbf{j}^0. \tag{9}$$

$$dp = Sd\theta + \rho d\mu + \rho c d\mu_p + \mathbf{j}^0 \cdot d\mathbf{u}, \quad \rho = \rho_s + \rho_f, \tag{10}$$

$$\nabla p = S\nabla\theta + \rho\nabla\mu + \rho c\nabla\mu_p + (\nabla\mathbf{u})^* \cdot \mathbf{j}^0. \tag{11}$$

Введём удельную энтропию $s = S/\rho$. Неизвестные потоки можно определить, так как уравнение энергии делает всю систему уравнений переопределённой. Так же как в [1] получаем следующие формулы:

$$\alpha = -1, \quad \beta = -s, \quad \gamma = -c, \quad \mathbf{F}_c = c\mathbf{j}, \tag{12}$$

$$\mathbf{F}_\theta = s\mathbf{j}, \quad \mathbf{j} = \rho_s\mathbf{v}_s + \rho_f\mathbf{v}_f, \quad \mathbf{j}^0 = \rho_s\mathbf{u}, \tag{13}$$

$$\Pi^0 = p \cdot I + \rho_s\mathbf{u} \otimes \mathbf{u}, \quad \Pi = pI + \rho_f\mathbf{v}_f \otimes \mathbf{v}_f + \rho_s\mathbf{v}_s \otimes \mathbf{v}_s. \tag{14}$$

Здесь $\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$ есть тензорное произведение двух векторов $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$, $(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b})_{ij} = a_i b_j$.

Заметим, что уравнение (4) можно записать в виде

$$\mathbf{v}_{ft} + (\mathbf{v}_f \cdot \nabla)\mathbf{v}_f = -\frac{\nabla p}{\rho} + \frac{\rho_s}{2\rho}\nabla|\mathbf{u}|^2. \tag{15}$$

Чтобы учесть диссипацию, будем искать законы сохранения в виде

$$\rho_t + \operatorname{div}\mathbf{j} = 0, \quad \mathbf{j}_t + \operatorname{div}(\Pi + \pi) = 0, \quad S_t + \operatorname{div}\left(\mathbf{F}_\theta + \frac{\mathbf{q}}{\theta}\right) = \frac{R}{\theta}, \tag{16}$$

$$\rho_{st} + \operatorname{div}(\rho_s\mathbf{v}_s) = 0, \quad (\rho c)_t + \operatorname{div}(\mathbf{F}_c + \mathbf{l}) = 0, \tag{17}$$

$$\mathbf{v}_{ft} + (\mathbf{v}_f \cdot \nabla)\mathbf{v}_f = -\frac{\nabla p}{\rho} + \frac{\rho_s}{2\rho}\nabla|\mathbf{u}|^2 + \mathbf{f}_2, \tag{18}$$

$$E_t + \operatorname{div}(\mathbf{Q} + \mathbf{Q}_1) = 0, \tag{19}$$

с неизвестными добавками

$$\pi,\ \mathbf{q},\ R,\ \mathbf{l},\ \mathbf{Q}_1, \mathbf{f}_2. \tag{20}$$

Переменные π, $\mathbf{q}$, R, $\mathbf{l}$, есть вязкая часть полного тензора напряжений, вектор поток тепла, производство энтропии и вектор потока концентрации соответственно.

Подобно тому, как это сделано в работе [1], для добавок (20) устанавливаются следующие формулы: $\pi = \pi^s + \pi^f$,

$$-\pi^i = 2\eta_i D_i, \quad 2D^i = \nabla \mathbf{v}_i + (\nabla \mathbf{v}_i)^*, \tag{21}$$

$$\mathbf{l} = -\alpha_1 \nabla \mu_p, \tag{22}$$

$$\rho_f \mathbf{f}_2 = k\mathbf{u} - \operatorname{div} \pi_f, \quad \mathbf{q} = -\varkappa \nabla \theta, \tag{23}$$

$$R = \frac{\varkappa |\nabla \theta|^2}{\theta} + 2\eta_f |D_f|^2 + 2\eta_s |D_s|^2 + \frac{|\mathbf{l}|^2}{\alpha_1} + k|\mathbf{u}|^2. \tag{24}$$

Здесь $\varkappa$ — теплопроводность, η_i и λ_i — вязкости, k и α_1 — термодинамические параметры. При указанном выборе производство энтропии R будет неотрицательным, если все параметры в формулах (21)–(23) считать положительными.

Закон Фика (22) можно представить в другом виде. Будем считать, что химический потенциал μ есть известная функция переменных p, θ, c и $\mathbf{u}^2$. Поэтому

$$\nabla \mu = \partial_p \mu \nabla\, p + \partial_\theta \mu \nabla\, \theta + \partial_c \mu \nabla\, c + \partial_u \mu \nabla\, \mathbf{u}^2, \quad \partial_p \mu \equiv \frac{\partial \mu}{\partial p}. \tag{25}$$

Из (11) следует, что

$$\nabla\, \mu_p = \tilde{\gamma}_1 \nabla\, p + \tilde{\gamma}_2 \nabla\, \theta + \tilde{\gamma}_3 \nabla\, c + \tilde{\gamma}_4 \nabla\, \mathbf{u}^2, \tag{26}$$

где

$$\tilde{\gamma}_1 = \frac{1 - \rho \partial_p \mu}{\rho c}, \quad \tilde{\gamma}_2 = -\frac{S + \rho \partial_\theta \mu}{\rho c}, \quad \tilde{\gamma}_3 = -\frac{\partial_c \mu}{c}, \quad \tilde{\gamma}_4 = -\frac{\rho_s/2 + \rho \partial_u \mu}{\rho c}. \tag{27}$$

Теперь формула (22) сводится к следующей:

$$\mathbf{l} = -\left(\gamma_3 \nabla c + \gamma_1 \nabla p + \gamma_2 \nabla \theta + \gamma_4 \nabla\, \mathbf{u}^2\right), \quad \gamma_i = \alpha_1 \tilde{\gamma}_i. \tag{28}$$

Обычно закон Фика пишут как закон диффузии

$$\mathbf{l} = -\rho D(\nabla\, c + k_\theta \nabla\, \theta + k_p \nabla\, p), \tag{29}$$

где D — коэффициент диффузии [9]. Поэтому ниже будут использоваться формулы

$$\gamma_1 = \rho D k_p, \quad \gamma_2 = \rho D k_\theta, \quad \gamma_3 = \rho D. \tag{30}$$

Запишем систему (16)–(18) в терминах фазовых переменных. Скорость $\mathbf{v}_f$ удовлетворяет уравнению

$$(\rho_f \mathbf{v}_f)_t + \operatorname{div}(\rho_f \mathbf{v}_f \otimes \mathbf{v}_f) = -\frac{\rho_f \nabla p}{\rho} + \frac{\rho_f \rho_s}{2\rho} \nabla |\mathbf{u}|^2 + k\mathbf{u} + \operatorname{div} T^f, \tag{31}$$

где

$$T^i = 2\eta_i D_i, \quad i = s, f, \tag{32}$$

Уравнение импульса для s-фазы есть следствие уравнений (31) и (16):

$$(\rho_s \mathbf{v}_s)_t + \operatorname{div}(\rho_s \mathbf{v}_s \otimes \mathbf{v}_s) = -\frac{\rho_s \nabla p}{\rho} - \frac{\rho_f \rho_s}{2\rho} \nabla |\mathbf{u}|^2 - k\mathbf{u} + \operatorname{div} T^s, \tag{33}$$

Законы сохранения масс

$$\rho_{st} + \operatorname{div}(\rho_s \mathbf{v}_s) = 0, \quad \rho_{ft} + \operatorname{div}(\rho_f \mathbf{v}_f) = 0, \quad (\rho c)_t + \operatorname{div}(c\mathbf{j} + \mathbf{l}) = 0 \tag{34}$$

есть следствия уравнений (16), (17), в которых $\mathbf{l}$ задаётся формулой (28). Уравнение для удельной энтропии s можно записать в виде

$$(\rho s)_t + \operatorname{div}\left(s\rho_s\mathbf{v}_s + s\rho_f\mathbf{v}_f + \frac{\mathbf{q}}{\theta}\right) = \frac{R}{\theta}, \quad \rho = \rho_f + \rho_s. \tag{35}$$

Внутренняя энергия

$$E^0 = E^0(s, \rho, c), \quad S = \rho s, \tag{36}$$

считается известной функцией. Абсолютная температура θ, химпотенциалы μ и μ_p, а также давление p вычисляются через внутреннюю энергию по формулам (8) и (9):

$$\theta = \frac{\partial E^0}{\partial S}, \quad \mu = \frac{\partial E^0}{\partial \rho}, \quad \mu_p = \frac{\partial E^0}{\partial(\rho c)}, \quad p = -E_0 + \theta S + \mu\rho + \mu_p\rho c + \mathbf{u}\cdot\mathbf{j}^0. \tag{37}$$

Пренебрегая тепловыми эффектами, применим сформулированные уравнения к задаче о седиментации в вертикальной или наклонной трубе Ω_α с отклонением от вертикальной оси на угол α (см. схему на рис. 2 (a,b). Длина трубы равна H. Предполагается, что труба имеет радиус R, нижний конец трубы имеет форму полусферы также радиусом R; верхний конец совпадает с круглым поперечным сечением.

Предположим, что плотности материалов постоянны, а объёмная доля жидкости, смачивающей сухие частицы, пренебрежимо мала:

$$\bar\rho_i = \text{const}, \quad \phi_m \approx 0, \quad i = f, p, m. \tag{38}$$

Теперь из определения концентрации c и из формул (34) следует, что

$$c = \frac{\rho_s}{\rho}, \quad 1 - c = \frac{\rho_f}{\rho}, \quad \varphi_s = \frac{c}{\bar r + c(1-\bar r)}, \quad \rho = \frac{\bar\rho_s}{\bar r + c(1-\bar r)}, \tag{39}$$

где $\bar r = \bar\rho_s/\bar\rho_f$. Заметим, что парциальные плотности ρ_s и ρ_f а также полная плотность $\rho = \rho_s + \rho_f$ не являются постоянными:

$$\frac{\rho_s}{\bar\rho_f} = c[1 + (\bar r - 1)\phi_s(c)] \equiv r_s(c), \quad \frac{\rho_f}{\bar\rho_f} = 1 - \phi_s(c) \equiv r_f(c), \quad \frac{\rho}{\bar\rho_f} = r_s + r_f \equiv r, \tag{40}$$

здесь $r_s(c)$ $r_f(c)$ обозначают безразмерные парциальные плотности.

Складывая уравнения

$$\frac{\partial\phi_s}{\partial t} + \operatorname{div}(\phi_s\mathbf{v}_s) = 0, \quad \frac{\partial\phi_f}{\partial t} + \operatorname{div}(\phi_f\mathbf{v}_f) = 0, \tag{41}$$

вытекающие из (34), и используя формулу $\phi_s + \phi_f = 1$, приходим к уравнению

$$\operatorname{div}\mathbf{v} = 0 \tag{42}$$

для среднеобъемной скорости

$$\mathbf{v} \equiv \varphi_s(c)\mathbf{v}_s + \varphi_f(c)\mathbf{v}_f, \quad \varphi_f = \frac{\bar r(1-c)}{\bar r + c(1-\bar r)}. \tag{43}$$

Уравнение переноса концентрации принимает вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(c\mathbf{v}) + \rho^{-1}\operatorname{div}\mathbf{l} = 0, \quad \mathbf{l} = -\left(\gamma_3\nabla c + \gamma_1\nabla p + \gamma_4\nabla\mathbf{u}^2\right) + \rho c B\mathbf{g}_\alpha. \tag{44}$$

Отметим, что в законе Фика для потока концентрации присутствует гравитационный член $\rho c B \mathbf{g}_\alpha$ с коэффициентом мобильности B [9].

В работе [1] обосновывается, что B можно выбрать по формуле

$$B(c) = \frac{V_{St} H(c)}{g}, \quad V_{St} = \frac{2(\bar{\rho}_p - \bar{\rho}_f) g (d_p/2)^2}{9\eta_f}, \quad H = (1-c)^\nu, \tag{45}$$

где V_{St} — скорость проскальзывания Стокса, $H(c)$ — функция «препятствования», а d_p — диаметр частицы.

Коэффициенты диффузии γ_1 и γ_4 обращаются в ноль при $c = 0$ и при $c = 1$. Для случая седиментации можно использовать аппроксимацию $k = 18\eta_f c/(d_p^2)$, [1].

В ряде работ вязкость η_s выбирается по формуле Krieger — Douhgerty [1]: $\eta_s/\eta_{s0} = (1 - \phi_s(c)/\phi_{s*})^{-2.5}$, где η_{s0} — вязкость s-фазы, когда нет частиц, и ϕ_{s*} — эффективный максимальный объём доли частиц. Таким образом, неизвестные функции p, c, $\mathbf{v}_s$, $\mathbf{v}_f$, удовлетворяют уравнениям (31), (33), (42) и (44).

При выполнении условий несжимаемости (38) давление больше не является термодинамической переменной и, как в теории Навье — Стокса, включается в число неизвестных функций. Уравнения (41) играют роль законов сохранения массы.

2. СЕДИМЕНТАЦИЯ В НАКЛОННОЙ ТРУБЕ

Предполагается, что частицы изначально находятся в состоянии покоя и равномерно распределены вдоль трубки. В этом случае поток симметричен относительно плоского участка $\Sigma = (a, b, c, d)$, рис. 2(b), лежащего в плоскости, образованной векторами $\mathbf{e}$ и $\mathbf{g}$; здесь $\mathbf{g}$ — вектор гравитации, а $\mathbf{e}$ — единичный вектор, направленный вдоль оси трубки, так что $\mathbf{e} \cdot \mathbf{g} < 0$. Другими словами, Σ — это сечение трубки плоскостью, имеющей в качестве вектора нормали вектор $\mathbf{g} \times \mathbf{e}$. Наклон трубки определяется углом α между векторами $-\mathbf{e}$ и $\mathbf{g}$. В силу симметрии, поток массы через Σ отсутствует.

Рассмотрим эффект Бойкотта. Расчёты показывают, что зона чистой жидкости $c = 0$ сначала появляется в верхней части сосуда Ω_α, а затем расширяется вниз. Относительный объём этой зоны определяется следующим образом:

$$V(t) = |\Omega_\alpha|^{-1} \int\limits_{\Omega_\alpha} 1_{c=0}\, dxdydz,$$

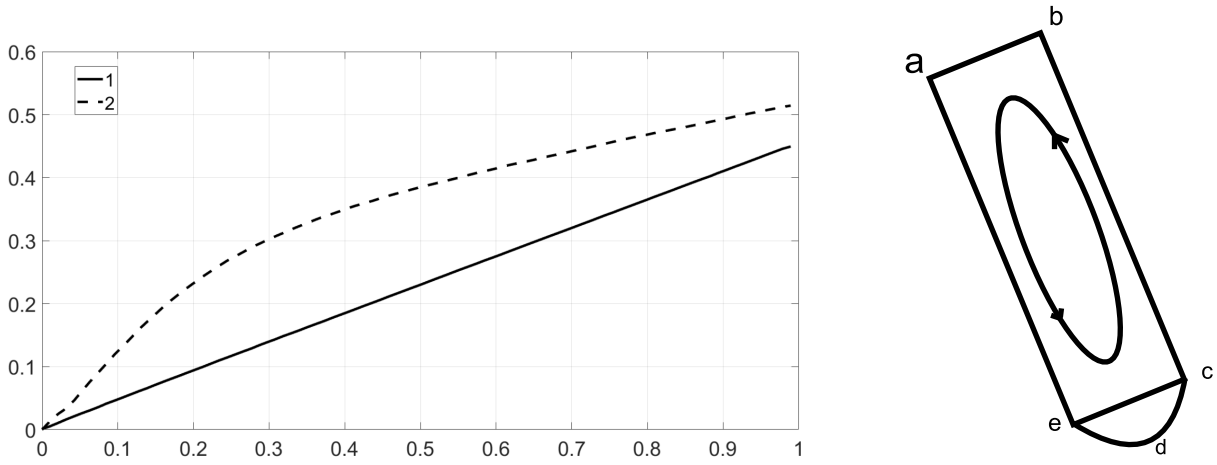
где 1_A — характеристическая функция множества A. На рис. 1 видно, что чем больше угол α, тем быстрее $V(t)$ растёт со временем. В чём причина?

Ответ связан с картиной течения. Результаты расчётов, касающихся поля скоростей $\mathbf{v}$, схематически представлены на рис. 2.

Имеется один вихрь, лежащий в сечении Σ, который преобладает над вихрями, наблюдаемыми в вертикальном случае, рис. 1(b). В поперечных сечениях E трубы обнаружены четыре вихря с чередующимися знаками, рис. 2(c) или два вихря в поперечных сечениях половины трубы, рис. 2(b). Подробные результаты расчётов, выполненных методом конечных элементов с помощью пакета FreeFem++, представлены на рис. 3.

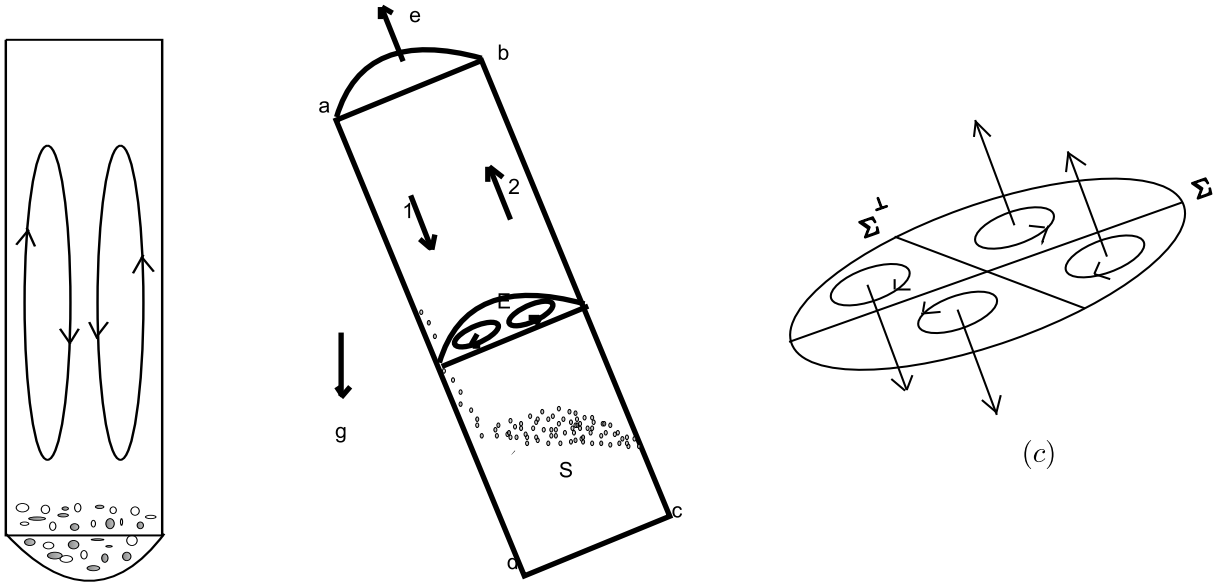
Поток, определяемый объёмной скоростью $\mathbf{v}$, имеет различные направления с разных сторон плоской поверхности $\Sigma^\perp$, где $\mathbf{v}$ обращается в нуль (см. рис. 2(c)). Заметим, что $\Sigma^\perp$ трансверсальна плоскости симметрии Σ. В вертикальной трубке отсутствуют спиральные движения. Нет наклона — нет циркуляций Ленгмюра.

Рассмотрим максимальный угол отклонения $\alpha = \pi/2$, соответствующий горизонтальной трубке. Чтобы уменьшить роль граничных условий на концах трубки, рассмотрим трубку бесконечной длины. Можно предположить, что движения частиц и жидкости одинаковы в каждом вертикальном сечении трубки. Поэтому достаточно выполнить двумерные расчёты. Результаты на рис. 4 показывают, что верхняя граница осадка практически плоская.



(a) (b)

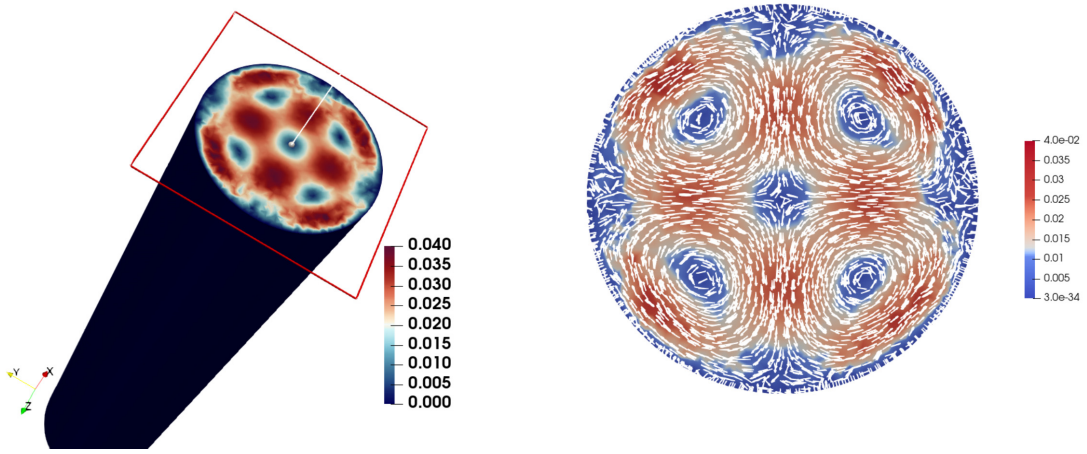
Рис. 1. (a) Относительный объём чистой жидкости $V(t)$ в зависимости от времени. Непрерывная и точечная линии соответствуют вертикальной и наклонной трубам (с углом 30 градусов). (b) Схема доминантного вихря в плоскости симметрии Σ для наклонной трубы



(a) (b) (c)

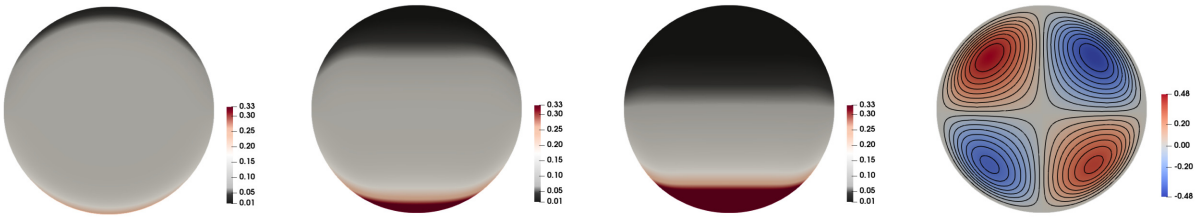
Рис. 2. (a) Схема вихрей в вертикальной трубе в сечении через ось симметрии. (b) Схема поля скорости $\mathbf{v}$ в наклонной половине трубы, полученной разрезанием плоскостью симметрии Σ. Объём S соответствует зоне осадка. (c) Схема вихрей в поперечном сечении E для наклонной трубы. Линии со стрелками соответствуют проекции нормализованной средне-объёмной скорости на ось трубы. Круги со стрелками означают проекцию траекторий (построенных по средне-объёмной скорости) на поперечное сечение трубы

Это связано с поперечной миграцией, показанной на рис. 2. Видно, что картина течения, связанная с полем скоростей $\mathbf{v}$, напоминает циркуляцию Ленгмюра. Можно заключить, что для течений в круглых трубах причиной циркуляции Ленгмюра является гравитация.



(a) (b)

Рис. 3. Результаты расчётов, выполненных методом конечных элементов с помощью пакета FreeFem++
(a) распределение модуля поперечной скорости $\mathbf{v}_2$ ($\mathbf{v}_2 \perp \mathbf{e}$);
(b) поле скорости $\mathbf{v}_2$ в поперечном сечении



(a) (b) (c) (d)

Рис. 4. (a)–(c) Распределение концентрации в горизонтальной трубе для трёх возрастающих моментов времени слева направо.
(d) Линии тока для поля $\mathbf{v}$

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Исследована седиментация частиц в суспензиях с использованием математического моделирования. Для этой цели были сформулированы уравнения, основанные на законах сохранения и принципах термодинамики. Частицы и несущая жидкость рассматривались в рамках взаимодействия двух континуумов. Законы сохранения получены с использованием подхода Ландау — Халатникова, который первоначально был разработан для описания сверхтекучести жидкого гелия II. В качестве применения изучена проблема осаждения частиц в трубе. Трёхмерные расчёты показали, что эффект Бойкотта действительно имеет место. Он означает, что седиментация усиливается в наклонной трубе. В чём причина? Выяснилось, что в наклонном сосуде наблюдается более интенсивное вихревое течение. В вертикальной трубе течение также вихревое, но оно слабее. В вертикальных и наклонных трубах вихревая картина различна. В вертикальной круглой трубе присутствуют только продольные вихри, тогда как в наклонной трубе есть также поперечные циркуляции. Вихревая картина напоминает циркуляцию Ленгмюра: в поперечных сечениях трубки обнаруживаются четыре вихря с чередующимися знаками. Если угол наклона максимален, т. е. трубка горизонтальна, также имеют место циркуляции типа Ленгмюра.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа первого из соавторов (теоретические результаты и вывод модели) выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России по теме «Современные методы гидродинамики для задач природопользования, индустриальных систем и полярной механики» (проект FZMW-2020-0008).

Работа второго соавтора (разработка численного метода и проведение расчетов) выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России по теме «Моделирование течения сложных жидкостей в трещиновато-пористых средах для оптимизации разработки трудноизвлекаемых запасов углеводородов» (проект FWGG-2026-0006).

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

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

ЛИТЕРАТУРА

1. *Shelukhin V.V., Neverov V.V.* Dense suspension flows: a mathematical model consistent with thermodynamics // J. Fluids Eng. ASME. 2022. V. 144, N 9. Article number 021402:1–13.
2. *Langmuir I.* Surface motion of water induced by wind // Science. 1938. V. 87. P. 119–123.
3. *Craik A.D.D.; Leibovich S.* A rational model for Langmuir circulations // J. Fluid Mech. 1976. V. 73. P. 401–426.
4. *Leibovich S.* The form and dynamics of Langmuir circulations // Annu. Rev. Fluid Mech. 1983. V. 15. P. 391–427.
5. *Thorpe, S.A.* Langmuir circulation // Annu. Rev. Fluid Mech. 2004. V. 36. P. 55–79; DOI: 10.1146/annurev.fluid.36.052203.071431
6. *Ellingsen S.Å., Akselsen A.H.; Chan L.* Designing vortices in pipe flow with topography-driven Langmuir circulation // J. Fluid Mech. 2021. V. 926, A9; DOI: 10.1017/jfm.2021.696
7. *Boycott A.* Sedimentation of blood corpuscles // Nature. 1920. V. 104(2621). P. 532–532.
8. *Nevskii Y., Osiptsov A.* Slow gravitational convection of disperse systems in domains with inclined boundaries // Fluid Dyn. 2011. V. 46, N 2. P. 225–239.
9. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Гидродинамика. Теоретическая физика. Т. VI. М.: Наука, 1986.

SIBERIAN JOURNAL OF INDUSTRIAL MATHEMATICS

UDC 532.584

VORTEX STRUCTURES DURING PARTICLE SEDIMENTATION IN AN INCLINED VESSEL

© 2026 V. V. Shelukhin[a], V. V. Neverov[b]

Lavrentyev Institute of Hydrodynamics SB RAS,
Acad. Lavrentyev ave., 15, Novosibirsk 630090, Russia

E-mails: [a]shelukhin@hydro.nsc.ru, [b]neverovvladim@gmail.com

Received 04.02.2026, revised 04.02.2026, accepted 16.09.2026

Abstract. The thermodynamics of a two-velocity continuum is discussed. A mathematical model of sedimentation in suspensions of solid particles is developed. Theoretical results are validated by the benchmark experiment known as the Boycott effect stating that the enhanced sedimentation occurs in a tilted vessel. By performing 3D calculations, we prove that particle settling in a circular tube is determined by vortices. In particular, it is established that the lateral migration of particles is caused by Langmuirlike circulations.

Keywords: suspensions, sedimentation, vortex structures.

DOI: 10.33048/SIBJIM.2026.29.310

REFERENCES

1. Shelukhin V.V., Neverov V.V. Dense suspension flows: a mathematical model consistent with thermodynamics. *J. Fluids Eng. ASME*, 2022, Vol. 144, No. 9. Article number 021402:1–13.
2. Langmuir I. Surface motion of water induced by wind. *Science*, 1938, Vol. 87, pp. 119–123.
3. Craik A.D.D.; Leibovich S. A rational model for Langmuir circulations. *J. Fluid Mech.*, 1976, Vol. 73, pp. 401–426.
4. Leibovich S. The form and dynamics of Langmuir circulations. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 1983, Vol. 15, pp. 391–427.
5. Thorpe, S.A. Langmuir circulation. *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 2004, Vol. 36, pp. 55–79; DOI: 10.1146/annurev.fluid.36.052203.071431
6. Ellingsen S.Å., Akselsen A.H.; Chan L. Designing vortices in pipe flow with topography-driven Langmuir circulation. *J. Fluid Mech.*, 2021, Vol. 926, A9; DOI: 10.1017/jfm.2021.696
7. Boycott A. Sedimentation of blood corpuscles. *Nature*, 1920, Vol. 104(2621), pp. 532–532.
8. Nevskii Y., Osiptsov A. Slow gravitational convection of disperse systems in domains with inclined boundaries. *Fluid Dyn.*, 2011, Vol. 46, No. 2, pp. 225–239.
9. Landau L.D., Lifshitz E.M. Gidrodinamika. Teoreticheskaya fizika [Hydrodynamics. Theoretical Physics]. Vol. VI. Moscow: Nauka, 1986.

English translation is published in Journal of Applied and Industrial Mathematics, 2026, Vol. 20, No. 3.

СИБИРСКИЙ ЖУРНАЛ ИНДУСТРИАЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ

2026. Том 29, № 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 17.11.2026 г.
Формат $60 \times 84\,{}^{1}/_{8}$. Усл. печ. л. 23,4.
Объём 18,2 МБ.

Издательство Института математики,
пр. Академика Коптюга, 4, Новосибирск 630090, Россия