



ВЕСТНИК

ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА

2017
Т. 9, № 2

ISSN 2075-809X (Print)
ISSN 2409-6547 (Online)

СЕРИЯ

«МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»

Решением ВАК России включен в Перечень рецензируемых научных изданий

Учредитель – Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования «Южно-Уральский государственный университет
(национальный исследовательский университет)»

Основной целью серии «Математика. Механика. Физика» является публикация и распространение оригинальных результатов научных исследований в области математики, механики и физики, а также их приложений в естественных, технических и экономических науках.

Редакционная коллегия

д.ф.-м.н., профессор **Загребина С.А.** (отв. редактор)
к.ф.-м.н., доцент **Голубев Е.В.** (отв. секретарь)
д.ф.-м.н., профессор **Бескачко В.П.** (ЮУрГУ)
к.ф.-м.н., профессор **Заляпин В.И.** (ЮУрГУ)
д.ф.-м.н., профессор **Ковалев Ю.М.** (ЮУрГУ)

Редакционный совет

д.т.н., профессор **Богомолов А.В.** (Государственный научный центр Российской Федерации – Федеральный медицинский биофизический центр имени А. И. Бурназяна, г. Москва)
д.ф.-м.н. **Бржезинская М.М.** (Берлинский центр материалов и энергии им. Гельмгольца, г. Берлин, Германия)
д.ф.-м.н., профессор **Жуковский В.И.** (Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва)
д.ф.-м.н., профессор **Короткий А.И.** (Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН, г. Екатеринбург)
д.ф.-м.н., член-корреспондент РАН, профессор Физики и Оптики **Зельдович Б.Я.** (КРЕОЛ, Университет Центральной Флориды, г. Орlando, США)
Ph. D., профессор **Ким Джейван** (Kim Jaewan, Корейский институт передовых исследований KIAS, г. Сеул, Корея)
Ph. D., профессор **Ким Кишик** (Kim Kisik, ИННА-Университет, г. Инчон, Корея)
д.ф.-м.н., профессор **Кундикова Н.Д.** (Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург)
д.ф.-м.н., профессор **Меньших В.В.** (Воронежский институт МВД Российской Федерации, г. Воронеж)
д.ф.-м.н., профессор **Пинчук С.И.** (Университет штата Индиана, г. Блумингтон, США)
Ph. D., ассистент-профессор **Пузырев Е.С.** (Университет Вандербильта, г. Нэшвилл, США)
д.т.н., профессор **Равшанов Н.К.** (Ташкентский университет информационных технологий, г. Ташкент, Узбекистан)
д.т.н., профессор **Уткин Л.В.** (Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург)
Prof. dr. ir. **Ферпуст И.** (Католический университет, г. Лёвен, Бельгия)
д.ф.-м.н., Ph. D., профессор **Штраус В.А.** (Университет Симона Боливара, г. Каракас, Венесуэла)

© Издательский центр ЮУрГУ, 2017



BULLETIN

OF THE SOUTH URAL
STATE UNIVERSITY

2017
Vol. 9, no. 2

SERIES

“MATHEMATICS.
MECHANICS. PHYSICS”

ISSN 2075-809X (Print)
ISSN 2409-6547 (Online)

Vestnik Yuzhno-Ural'skogo Gosudarstvennogo Universiteta.
Seriya “Matematika. Mekhanika. Fizika”

South Ural State University

The main purpose of the series «Mathematics. Mechanics. Physics» is to promote the results of research in mathematics, mechanics and physics, as well as their applications in natural, technical and economic sciences.

Editorial Board

S.A. Zagrebina, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E.V. Golubev, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
V.P. Beskachko, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
V.I. Zalyapin, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
Yu.M. Kovalev, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

Editorial Council

A.V. Bogomolov, State Scientific Center of the Russian Federation – A.I. Burnazyan Federal Medical Biophysical Center, the Russian Federal Medical-Biological Agency, Moscow, Russian Federation
M.M. Brzhezinskaya, Helmholtz-Zentrum Berlin for Materials and Energy, Berlin, Germany
V.I. Zhukovsky, Moscow State University, Moscow, Russian Federation
A.I. Korotkii, Institute of Mathematics and Mechanics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation
B.Ya. Zeldovich, CREOL, University of Central Florida, Orlando, United States of America
Jaewan Kim, Korea Institute for Advanced Study KIAS, Seoul, Korea
Kisik Kim, INHA-University, Incheon, Korea
N.D. Kundikova, Institute of Electrophysics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation
V.V. Menshikh, Voronezh Institute of Russian Ministry of Internal Affairs, Voronezh, Russian Federation
S.I. Pinchuk, Indiana University, Bloomington, United States of America
E.S. Puzryev, Vanderbilt University, Nashville, United States of America
N.K. Ravshanov, Tashkent University of Information Technologies, Tashkent, Uzbekistan
L.V. Utkin, Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg
I. Verpoest, Catholic University, Leuven, Belgium
V.A. Strauss, University of Simon Bolivar, Caracas, Venezuela

СОДЕРЖАНИЕ

Математика

- ГАМЗАЕВ Х.М. Численный метод решения одной нелокальной задачи трубопроводного транспорта вязких жидкостей..... 5
- МЕГРАЛИЕВ Я.Т., САФАРОВА А.Н. Об одной нелокальной обратной краевой задаче для параболического уравнения второго порядка..... 13
- МУСАКАЕВ Н.Г., БОРОДИН С.Л., БЕЛЬСКИХ Д.С. Математическая модель и алгоритм решения задачи неизотермической фильтрации газа в пласте с учетом разложения гидрата... 22
- НИКОЛАЕВ В.Г. Об одной скалярной форме двумерной задачи Шварца и ее применениях .. 30
- УХОБОТОВ В.И. Об одной линейной задаче управления при наличии помехи..... 36

Механика

- ДЕМИН В.А., ПЕТУХОВ М.И. О влиянии зависимости вязкости от температуры на стационарные конвективные течения в ячейке Хеле–Шоу..... 47
- КОВАЛЕВ Ю.М. Определение вида «упругой» составляющей уравнений состояния молекулярных кристаллов..... 55

Физика

- ANIKINA E.V., BESKACHKO V.P. Ab Initio Studies of Hydrogen Physisorption on Clear and Li-Doped Carbon Nanotubes 64
- САННИКОВ Г.П., КОРЕНЧЕНКО А.Е. Оценка вероятности образования долгоживущего димера меди в двухчастичном столкновении на основе молекулярно-динамического моделирования..... 72

CONTENTS

Mathematics

GAMZAEV K.M. Numerical Method for Solving a Nonlocal Problem on Pipeline Transportation of Viscous Liquid.....	5
MEHRALIEV Ya.T., SAFAROVA A.N. On One Nonlocal Inverse Boundary Problem for the Second-Order Parabolic Equation.....	13
MUSAKAEV N.G., BORODIN S.L., BELSKIKH D.S. Mathematical Model and Algorithm for Solving the Problem of Non-Isothermal Gas Filtration in Reservoir in Case of Hydrate Decomposition.....	22
NIKOLAEV V.G. One Form of the Scalar Two-Dimensional Schwarz Problem and its Applications.....	30
UKHOBOTOV V.I. On a Linear Control Problem under Interference.....	36

Mechanics

DEMIN V.A., PETUKHOV M.I. The Effect of Temperature Dependence of the Viscosity on Stationary Convective Flows in Hele–Shaw Cell.....	47
KOVALEV Yu.M. Determination of the Form of “Elastic” Component of the Equations of State of Molecular Crystals.....	55

Physics

ANIKINA E.V., BESKACHKO V.P. Ab Initio Studies of Hydrogen Physisorption on Clear and Li-Doped Carbon Nanotubes	64
SANNIKOV G.P., KORENCHENKO A.E. Estimated Probability of Copper Long-Lived Dimer Formation in Two Particle Collisions Based on the Molecular Dynamics Simulation	72

ЧИСЛЕННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ ОДНОЙ НЕЛОКАЛЬНОЙ ЗАДАЧИ ТРУБОПРОВОДНОГО ТРАНСПОРТА ВЯЗКИХ ЖИДКОСТЕЙ

Х.М. Гамзаев

Азербайджанский государственный университет нефти и промышленности, г. Баку, Азербайджан

E-mail: xan.h@rambler.ru

Рассматривается задача по определению распределения скоростей в поперечном сечении трубопровода для нестационарного осесимметричного потока несжимаемой вязкой жидкости при неизвестном условии на стенке трубопровода. Законы изменения во времени перепада давления по длине трубопровода и объемного расхода жидкости в трубопроводе считаются заданными. Данная задача относится к классу нелокальных задач с интегральными условиями для дифференциальных уравнений в частных производных. Путем интегрирования уравнения исходная задача преобразуется к прямой задаче с локальными условиями. Построен дискретный аналог последней задачи в виде неявной разностной схемы и предложен вычислительный алгоритм решения полученной системы разностных уравнений.

Ключевые слова: трубопроводный транспорт; вязкая жидкость; осесимметричное течение; нелокальная задача с интегральным условием; разностный метод.

Введение

В современной технике для перемещения разнообразных жидкостей применяются трубопроводы, начиная с самых незначительных размеров, используемых в лабораторной технике и контрольно-измерительной аппаратуре, до магистральных [1–3]. Обычно при проектировании трубопроводов задаются расход жидкости, который служит основной характеристикой производительности трубопровода в соответствии с его назначением, и положения начального и конечного пунктов трубопровода. При этом одной из основных задач является определение гидравлической характеристики трубопровода, т. е. определение перепада давления, необходимого для пропуска заданного расхода жидкости по данному трубопроводу. В практике для решения этой задачи в качестве расчетной формулы используется формула Дарси–Вейсбаха [3–6]

$$\Delta P = \lambda \frac{\rho \bar{u}^2}{2d} l,$$

где ΔP – перепад давления на участке трубопровода длиной l , d – диаметр трубопровода, λ – коэффициент гидравлического сопротивления, ρ – плотность жидкости, \bar{u} – средняя скорость по сечению трубопровода.

Данную формулу, а также явное выражение для коэффициента гидравлического сопротивления для ламинарного режима можно получить из точного решения уравнения стационарного течения однородных несжимаемых жидкостей по трубопроводу при соответствующих реологических законах. При этом в качестве граничного условия на стенке трубопровода используется так называемое «условие прилипания». Так возникает известный параболический профиль скорости в стационарных течениях вязких жидкостей под действием перепада давления. Однако многие исследователи на основании молекулярных гипотез приходят к выводу, что вместо условия прилипания на твердой стенке трубопровода имеет место условие скольжения [7, 8]. В литературе рассматриваются три модели взаимодействия жидкостей с твердой стенкой, которые соответствуют следующим граничным условиям: прилипание, проскальзывание по закону Навье и проскальзывание с предельным напряжением [9–12]. Однако при моделировании течения жидкостей в трубопроводах практически невозможно определить, какое из этих граничных условий реализуется на стенке трубопровода. В связи с этим для практики трубопроводного транспорта

важное значение имеет исследование по определению закона распределения скоростей в поперечном сечении трубопровода для нестационарных потоков транспортируемых вязких жидкостей при неизвестном условии на стенке трубопровода.

В данной работе задача определения поля скоростей для нестационарных потоков вязких жидкостей в трубопроводах представляется как нелокальная задача с интегральным условием для уравнения нестационарного течения несжимаемой вязкой жидкости в трубопроводе.

Постановка задачи

Пусть имеется горизонтально расположенный простой трубопровод с жесткими стенками, длиной l , радиусом R , и по нему перекачивается вязкая несжимаемая жидкость. Предполагается, что ось Oz направлена по оси трубопровода и поток направлен вдоль оси трубы так, что из трех компонент скорости (u_r, u_φ, u_z) остается лишь одна $u_z \neq 0$, а $u_r = 0$ и $u_\varphi = 0$. Считая течение жидкости осесимметричным, полную систему дифференциальных уравнений, описывающих данное течение, можно представить в виде [4]

$$\begin{aligned} \frac{\partial u_z}{\partial t} + u_z \frac{\partial u_z}{\partial z} &= \frac{\nu}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u_z}{\partial r} \right) - \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z}, \quad 0 < r < R, 0 < t \leq T, \\ \frac{\partial u_z}{\partial z} &= 0, \quad \frac{\partial u_z}{\partial \varphi} = 0, \quad \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial r} = 0, \quad \frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial \varphi} = 0, \end{aligned} \quad (1)$$

где u_z – компонента скорости течения жидкости, направленная параллельно оси трубопровода, P – давление, ρ – плотность жидкости, $\nu = \mu/\rho$ – кинематическая вязкость, μ – динамическая вязкость жидкости. Из второго и третьего уравнения системы (1) следует, что u_z представляет функцию только r и t , а из двух последних – независимость давления P от r и φ . А это означает, что $\frac{\partial P}{\partial z}$ является функцией только времени.

Полагая

$$u(r, t) = u_z(r, t), \quad -\frac{\partial P}{\partial z} = \frac{\Delta P(t)}{l},$$

из системы (1) приходим к следующей форме уравнения нестационарного течения вязкой несжимаемой жидкости по трубопроводу

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\nu}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{\Delta P(t)}{l}, \quad 0 < r < R, 0 < t \leq T, \quad (2)$$

где $\Delta P(t)$ – перепад давления по длине трубопровода в направлении потока.

Плотность жидкости ρ , кинематическая вязкость ν и перепад давления $\Delta P(t)$ считаются заданными.

Пусть для уравнения (2) задаются начальное условие

$$u|_{t=0} = \psi(r), \quad (3)$$

и естественное граничное условие ограниченности решения при $r=0$, которое эквивалентно условию

$$\frac{\partial u}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0. \quad (4)$$

Однако в связи с тем, что скорость течения жидкости на стенке трубопровода не доступна непосредственному измерению и не может регулироваться, сформулировать граничное условие, соответствующее взаимодействию жидкости с твердой стенкой трубопровода не представляется возможным. Следовательно, чтобы сформулировать корректную задачу, помимо условий (3), (4) необходимо задавать дополнительное условие. Предположим, что закон изменения во времени объемного расхода жидкости в трубопроводе $Q(t)$ известен. Тогда дополнительное условие для уравнения (2) можно представить в виде

$$\int_0^R 2\pi r u dr = Q(t). \quad (5)$$

При этом предполагается выполнение условия согласования

$$2\pi \int_0^R \psi(r) dr = Q(0).$$

Таким образом, задача заключается в определении в прямоугольной области $\{0 \leq r \leq R, 0 \leq t \leq T\}$ функции $u(r, t)$, удовлетворяющей уравнению (2) и условиям (3)–(5). Задача (2)–(5) относится к классу нелокальных задач с интегральными условиями для дифференциальных уравнений в частных производных [13–16]. Необходимо отметить, что задание нелокального условия (5) приводит к возникновению значительных трудностей при численном решении нелокальной задачи (2)–(5) именно из-за отсутствия какой-либо информации об искомом решении на границе области.

Метод решения

Задачу (2)–(5) сведем к задаче с локальными условиями. Дифференцируем соотношение (5) по переменной t

$$2\pi \int_0^R r \frac{\partial u}{\partial t} dr = \frac{dQ}{dt}.$$

Подставим в это соотношение выражения для $\frac{\partial u}{\partial t}$ из уравнения (2)

$$2\pi \int_0^R r \left[\frac{v}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{1}{\rho} \frac{\Delta P(t)}{l} \right] dr = \frac{dQ}{dt}.$$

Выполнив интегрирование по частям и учитывая условие (4), получим

$$vr \frac{\partial u}{\partial r} \Big|_{r=R} + \frac{R^2}{2\rho} \frac{\Delta P(t)}{l} = \frac{1}{2\pi} \frac{dQ}{dt}.$$

Разрешив последнее уравнение относительно $\frac{\partial u}{\partial r} \Big|_{r=R}$, получим недостающее граничное условие на стенке трубопровода для уравнения (2)

$$\frac{\partial u}{\partial r} \Big|_{r=R} = \frac{1}{2\pi v R} \frac{dQ}{dt} - \frac{R}{2\rho l v} \Delta P(t). \quad (6)$$

Теперь задача заключается в определении функции $u(r, t)$, удовлетворяющей уравнению (2) и начальному условию (3) и локальным граничным условиям (4), (6).

Для численного решения полученной задачи (2)–(4), (6) используем метод конечных разностей. С этой целью введем равномерную разностную сетку

$$\bar{\omega} = \{(r_i, t_j) : r_i = i\Delta r, t_j = j\Delta t, i = 0, 1, 2, \dots, n, j = 0, 1, 2, \dots, m\}$$

– в прямоугольной области $\{0 \leq r \leq R, 0 \leq t \leq T\}$ с шагами $\Delta r = R/n$ по переменной r и $\Delta t = T/m$ по времени t . Пользуясь интегральным методом дискретизации, уравнению (2) во внутренних узлах сетки $\bar{\omega}$ поставим в соответствие неявную разностную схему [17]

$$\frac{u_i^{j+1} - u_i^j}{\Delta t} = \frac{v}{r_i \Delta r} \left[r_{i+1/2} \frac{u_{i+1}^{j+1} - u_i^{j+1}}{\Delta r} - r_{i-1/2} \frac{u_i^{j+1} - u_{i-1}^{j+1}}{\Delta r} \right] + \frac{1}{\rho l} \Delta P^{j+1},$$

где $u_i^j \approx u(r_i, t_j)$, $\Delta P^j = \Delta P(t_j)$, $r_{i\pm 1/2} = r_i \pm \Delta r/2$, $i = 1, 2, 3, \dots, n-1$, $j = 1, 2, 3, \dots, m-1$.

Начальное условие (3) аппроксимируется точно:

$$u_i^0 = \psi_i, \quad i = 0, n.$$

Для повышения порядка аппроксимации граничных условий (4), (6) снова используем интегральный метод дискретизации. В результате будем иметь:

$$\frac{u_0^{j+1} - u_0^j}{\Delta t} \frac{R^2 - r_{1/2}^2}{2} = v r_{1/2} \frac{u_1^{j+1} - u_0^{j+1}}{\Delta r} + \frac{r_{1/2}^2}{2\rho l} \Delta P^{j+1},$$

$$\frac{u_n^{j+1} - u_n^j}{\Delta t} \frac{R^2 - r_{n-1/2}^2}{2} = \frac{1}{2\pi} \frac{Q^{j+1} - Q^j}{\Delta t} - v r_{n-1/2} \frac{u_n^{j+1} - u_{n-1}^{j+1}}{\Delta r} - \frac{r_{n-1/2}^2}{2\rho l} \Delta P^{j+1},$$

где $\psi_i = \psi(r_i)$, $Q^j = Q(t_j)$.

Преобразуем полученную систему разностных уравнений к следующему виду:

$$a_i u_{i-1}^{j+1} - c_i u_i^{j+1} + b_i u_{i+1}^{j+1} = -\left(u_i^j + \frac{\Delta t}{\rho l} \Delta P^{j+1}\right), \quad i = 1, 2, 3, \dots, n-1, \quad j = 1, 2, 3, \dots, m-1, \quad (7)$$

$$u_i^0 = \psi_i, \quad i = \overline{0, n}, \quad (8)$$

$$u_0^{j+1} = \theta_1 u_1^{j+1} + \eta_1, \quad (9)$$

$$u_n^{j+1} = \theta_2 u_{n-1}^{j+1} + \eta_2, \quad (10)$$

где

$$a_i = \frac{v \Delta t r_{i-1/2}}{r_i \Delta r^2}; \quad b_i = \frac{v \Delta t r_{i+1/2}}{r_i \Delta r^2}; \quad c_i = a_i + b_i + 1; \quad \theta_1 = \frac{v \Delta t r_{1/2}}{0,5 r_{1/2}^2 \Delta r + v \Delta t r_{1/2}};$$

$$\eta_1 = \frac{0,5 r_{1/2}^2 \Delta r u_0^j + 0,5 \Delta P^{j+1} r_{1/2}^2 \Delta r \Delta t / \rho l}{0,5 r_{1/2}^2 \Delta r + v \Delta t r_{1/2}};$$

$$\eta_2 = \frac{0,5 \Delta r (Q^{j+1} - Q^j) / \pi + 0,5 (R^2 - r_{n-1/2}^2) \Delta r u_n^j - 0,5 \Delta P^{j+1} r_{n-1/2}^2 \Delta r \Delta t / \rho l}{0,5 (R^2 - r_{n-1/2}^2) \Delta r + v \Delta t r_{n-1/2}};$$

$$\theta_2 = \frac{v \Delta t r_{n-1/2}}{0,5 (R^2 - r_{n-1/2}^2) \Delta r + v \Delta t r_{n-1/2}}.$$

Разностная задача (7)–(10) при каждом фиксированном значении j , $j = \overline{1, m-1}$ представляет собой систему линейных алгебраических уравнений с трехдиагональной матрицей, в которой в качестве неизвестных выступают приближенные значения искомой функций $u(x, t)$ в узлах разностной сетки, т. е. u_i^{j+1} , $i = \overline{0, n}$, $j = \overline{1, m-1}$.

Для решения таких систем можно использовать алгоритм Томаса, представляющий собой экономичный вариант алгоритма для метода последовательного исключения неизвестных Гаусса (метод прогонки) [18]. Согласно алгоритму Томаса решение системы (7)–(10) при каждом фиксированном значении j , $j = \overline{1, m-1}$ представляется в виде

$$u_i^{j+1} = \alpha_{i+1} u_{i+1}^{j+1} + \beta_{i+1}, \quad i = n-1, n-2, \dots, 1, 0, \quad u_n^{j+1} = \frac{\theta_2 \beta_n + \eta_2}{1 - \theta_2 \alpha_n},$$

где коэффициенты α_i, β_i , $i = 1, 2, 3, \dots, n$ определяются по формулам:

$$\alpha_1 = \theta_1, \quad \beta_1 = \eta_1, \quad \alpha_{i+1} = \frac{b_i}{c_i - a_i \alpha_i}, \quad \beta_{i+1} = \frac{a_i \beta_i + u_i^j + \Delta t \Delta P^{j+1} / \rho l}{c_i - a_i \alpha_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n-1.$$

Результаты численных расчетов. Для выяснения эффективности практического применения предложенного вычислительного алгоритма были проведены численные эксперименты для модельных задач. Схема численного эксперимента заключается в следующем: задается скорость течения жидкости на стенке трубопровода

$$u|_{r=R} = g(t),$$

и с учетом этого условия определяется $u(r, t)$ решение прямой задачи (2)–(4). Далее, по формуле (5) определяется $Q(t)$ объемный расход жидкости в трубопроводе, и найденная зависимость принимается за точные данные для численного решения задачи (2)–(4), (6).

Расчеты выполнялись на пространственно-временной разностной сетке с шагами $\Delta r = 0,01$ м, $\Delta t = 1$ с. Результаты численного эксперимента, проведенного для случая $R = 0,6$ м; $\mu = 10^{-3}$ Па·с; $\rho = 1000$ кг/м³; $\psi(r) = 0,0001$ м/с; $\Delta P(t) = 0,01 \cdot 10^5$ Па; $g(t) = 0,0001$ м/с; $l = 5000$ м представлены в табл. 1; в ней u^t и \bar{u} – точные и вычисленные значения функции $u(r, t)$, м/с.

Результаты численного эксперимента показывают, что значения искомой функции $u(r, t)$ восстанавливаются с очень высокой точностью во всех точках разностной сетки.

Таблица 1

r, м	t = 600 с		t = 900 с		t = 1500 с		t = 1800 с	
	u^t	\bar{u}	u^t	\bar{u}	u^t	\bar{u}	u^t	\bar{u}
0,00	0,1201	0,1201	0,1801	0,1801	0,3001	0,3001	0,3601	0,3601
0,05	0,1201	0,1201	0,1801	0,1801	0,3001	0,3001	0,3601	0,3601
0,10	0,1201	0,1201	0,1801	0,1801	0,3001	0,3001	0,3601	0,3601
0,15	0,1201	0,1201	0,1801	0,1801	0,3001	0,3001	0,3601	0,3601
0,20	0,1201	0,1201	0,1801	0,1801	0,3001	0,3001	0,3601	0,3601
0,25	0,1201	0,1201	0,1801	0,1801	0,3001	0,3001	0,3601	0,3601
0,30	0,1201	0,1201	0,1801	0,1801	0,3001	0,3001	0,3601	0,3601
0,35	0,1201	0,1201	0,1801	0,1801	0,3001	0,3001	0,3601	0,3601
0,40	0,1201	0,1201	0,1801	0,1801	0,3001	0,3001	0,3600	0,3600
0,45	0,1201	0,1201	0,1801	0,1801	0,2997	0,2997	0,3590	0,3590
0,50	0,1200	0,1200	0,1792	0,1793	0,2936	0,2937	0,3481	0,3482
0,55	0,1131	0,1132	0,1608	0,1610	0,2425	0,2426	0,2785	0,2786
0,60	0,0001	0,0003	0,0001	0,0003	0,0001	0,0003	0,0001	0,0002

Предложенный вычислительный алгоритм также опробован на данных модели стационарно-го течения вязкой несжимаемой жидкости в трубопроводе

$$\frac{\mu}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{du}{dr} \right) = -\frac{\Delta P}{l}, \quad 0 < r < R,$$

$$\frac{du}{dr} \Big|_{r=0} = 0, \quad \int_0^R 2\pi r u dr = Q,$$

где Q и ΔP являются постоянными. Данная задача имеет точное решение

$$u(r) = \frac{Q}{\pi R^2} + \frac{\Delta P}{8\mu l} (R^2 - 2r^2). \quad (11)$$

По заданным постоянным значениям Q и ΔP численно определялись распределения скоростей по поперечному сечению трубопровода как по предложенному вычислительному алгоритму, так и по точной формуле (11). Результаты численных расчетов, проведенных для случая

$\rho = 1000 \text{ кг/м}^3$; $\mu = 10^{-3} \text{ Па}\cdot\text{с}$; $Q = 1,885 \text{ м}^3/\text{с}$; $\Delta P/l = 0,2 \cdot 10^{-4} \text{ Па/м}$; $R = 0,6 \text{ м}$, представлены в табл. 2; в ней \bar{u} – вычисленные значения скорости течения при выходе на стационар по предложенному алгоритму, м/с; u_{st} – вычисленные значения скорости течения по формуле (11), м/с.

Анализ полученных результатов показывает, что по заданным значениям Q и ΔP с высокой точностью можно восстановить распределения скоростей по поперечному сечению трубопровода. Результаты численных экспериментов свидетельствуют, что при течении вязкой несжимаемой жидкости в трубопроводе не всегда выполняется условие прилипания жидкости к стенке трубопровода.

Заключение

Рассмотрена задача определения распределения скоростей по поперечному сечению трубопровода для нестационарного потока вязкой несжимаемой жидкости на основании информации об изменении во времени объёмного расхода жидкости и перепада давления по длине трубопровода. Вычислительный алгоритм для решения данной задачи базируется на сведениях нелокальной задачи с интегральным условием к задаче с локальными условиями. Предложенный вычислительный алгоритм также можно использовать при определении гидравлической характеристики трубопроводов.

Таблица 2

г, м	\bar{u}	u_{st}
0,00	1,6676	1,6677
0,05	1,6676	1,6677
0,10	1,6675	1,6676
0,15	1,6675	1,6676
0,20	1,6674	1,6675
0,25	1,6673	1,6674
0,30	1,6671	1,6672
0,35	1,6670	1,6671
0,40	1,6668	1,6669
0,45	1,6666	1,6667
0,50	1,6663	1,6664
0,55	1,6661	1,6662
0,60	1,6658	1,6659

Литература

1. Лурье, М.В. Математическое моделирование процессов трубопроводного транспорта нефти, нефтепродуктов и газа / М.В. Лурье. – М.: ФГУП Изд-во «Нефть и газ» РГУ нефти и газа им. И.М. Губкина, 2003. – 336 с.
2. Леонов, Е.Г. Гидроаэромеханика в бурении / Е.Г. Леонов, В.И. Исаев. – М.: Недра, 1987. – 304 с.
3. Басниев, К.С. Нефтегазовая гидромеханика / К.С. Басниев, Н.М. Дмитриев, Г.Д. Розенберг. – Москва–Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2005. – 544 с.
4. Лойцянский, Л.Г. Механика жидкости и газа / Л.Г. Лойцянский. – М.: Наука, 1987. – 840 с.
5. Рабинович, Е.З. Гидравлика / Е.З. Рабинович. – М.: Недра, 1980. – 278 с.
6. Шлихтинг, Г. Теория пограничного слоя / Г. Шлихтинг. – М: Наука, 1969. – 711 с.
7. Neto, S. Boundary slip in Newtonian liquids: a review of experimental studies / S. Neto, D. Evans, E. Bonaccorso // Reports on Progress in Physics. – 2005. – Vol. 68, no. 12. – P. 2859–2897.
8. Lauga, E. Microfluidics: the no-slip boundary condition in Handbook of Experimental Fluid Dynamics / E. Lauga, M.P. Brenner, H.A. Stone. – New York: Springer, 2006. – P. 1219–1240.
9. Янков, В.И. Переработка волокнообразующих полимеров. Основы реологии полимеров и течение полимеров в каналах / В.И. Янков. – Москва–Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика», Институт компьютерных исследований, 2008. – 264 с.
10. Rao, I.J. The effect of the slip boundary condition on the flow of fluids in a channel / Rao I.J., K.R. Rajagopal // Acta Mechanica. – 1999. – Vol. 135. – P. 113–126.
11. Борзенко, Е.И. Исследование явления проскальзывания в случае течения вязкой жидкости в изогнутом канале / Е.И. Борзенко, О.А. Дьякова, Г.Р. Шрагер // Вестник Томского Государственного Университета. Математика и Механика. – 2014. – № 2(28). – С. 35–44.
12. Volker, J. Slip with friction and penetration with resistance boundary conditions for the Navier–Stokes equation – numerical tests and aspects of the implementation / J. Volker // J. Computational and Applied Mechanics. – 2002. – Vol. 147, Issue 2. – P. 287–300.
13. Cannon, J.R. The solution of heat equation subject to the specification of energy / J.R. Cannon // Quart. Appl. Math. – 1963. – Vol. 21, № 2. – P. 155–160.
14. Ионкин, Н.И. Решение одной краевой задачи теории теплопроводности с неклассическим краевым условием / Н.И. Ионкин // Дифференциальные уравнения. – 1977. – Т. 13, № 2. – С. 294–304.
15. Самарский, А.А. О некоторых проблемах современной теории дифференциальных уравнений / А.А. Самарский // Дифференциальные уравнения. – 1980. – Т. 16, № 11. – С. 1925–1935.
16. Нахушева, В.А. Дифференциальные уравнения математических моделей нелокальных процессов / В.А. Нахушева. – М.: Наука, 2006. – 173 с.
17. Самарский, А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский. – М. Наука, 1989. – 616 с.
18. Самарский, А.А. Численные методы решения обратных задач математической физики / А.А. Самарский, П.Н. Вабищевич. – М.: Издательство ЛКИ, 2009. – 480 с.

Поступила в редакцию 8 июля 2016 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2017, vol. 9, no. 2, pp. 5–12*

DOI: 10.14529/mmph170201

NUMERICAL METHOD FOR SOLVING A NONLOCAL PROBLEM ON PIPELINE TRANSPORTATION OF VISCOUS LIQUID

K.M. Gamzaev

*Azerbaijan State Oil and Industry University, Baku, Azerbaijan
E-mail: xan.h@rambler.ru*

The paper deals with a process of unsteady axisymmetric flow of incompressible viscous liquid in the cylindrical pipeline, described by the nonlinear system of Navier-Stokes differential equations. The set of equations is transformed into one linear parabolic equation with an initial and natural boundary

condition on the pipeline axis. We face a problem for determining velocity distribution in a cross-section of the pipeline based on the desired law of time variation of the pressure drop along the pipeline. As in case of liquid flow in pipes it's practically impossible to define interaction models of fluid with a solid boundary, the boundary condition on the pipe wall is considered as unknown. For the problem accuracy an additional condition in the form of integral flow characteristic is specified. In other words, the law of time variation of volumetric flow rate in the pipeline is specified. This problem is related to nonlocal problems with an integral condition for partial differential equations.

The specified integral condition is differentiated in time and the obtained ratio with the help of the differential equation is transformed into a local boundary condition. As a result, the set task is altered to a direct problem with local conditions. The finite difference method is applied for numerical solution of the boundary value problem. For this purpose, we create a discrete analog of the problem in the form of an implicit difference scheme using the integral method. A computational algorithm of solving the obtained difference equation system is suggested. Numerical experiments for test problems have been conducted to check the efficiency of practical application of the suggested computational algorithm. The computational algorithm has also been tried on the data of steady flow of viscous incompressible liquid in the pipeline.

Keywords: pipeline transportation; viscous liquid; axisymmetric flow; non-local problem with integral condition; finite difference method.

References

1. Lur'e M.V. *Matematicheskoe modelirovanie protsessov truboprovodnogo transporta nefti, nefteproduktov i gaza* (Mathematical modeling of processes of oil, oil products and gas pipeline transportation). Moscow, Neft i gaz Publ., 2003, 336 p. (in Russ.).
2. Leonov E.G., Isaev V.I. *Gidroaeromekhanika v bureanii* (Aerohydrodynamics in drilling). Moscow, Nedra Publ., 1987, 304 p. (in Russ.).
3. Basniev K.S., Dmitriev N.M., Rozenberg G.D. *Neftegazovaya gidromekhanika* (Oil and gas fluid mechanics). Moscow–Izhevsk, Institut kompiuternykh issledovaniy Publ., 2005, 544 p. (in Russ.).
4. Loitsianskii L.G. *Mekhanika zhidkosti i gaza* (Mechanics of liquid and gas). Moscow, Nauka Publ., 1987, 840 p. (in Russ.).
5. Rabinovich E.Z. *Gidravlika* (Hydraulics). Moscow, Nedra Publ., 1980, 278 p. (in Russ.).
6. Shlikhting G. *Teoriya pogrannichnogo sloia* (Boundary layer theory). Moscow, Nauka Publ., 1969, 711 p. (in Russ.).
7. Neto C., Evans D., Bonaccorso E. Boundary slip in Newtonian liquids: a review of experimental studies. *Reports on Progress in Physics*, 2005, Vol. 68, no. 12, pp. 2859–2897. DOI: 10.1088/0034-4885/68/12/R05
8. Lauga E., Brenner M.P., Stone H.A. *Microfluidics: The No-Slip Boundary Condition*. New York, Springer, 2006, pp. 1219–1240. DOI: 10.1007/978-3-540-30299-5_19
9. Yankov V.I. *Pererabotka voloknoobrazuyushchikh polimerov. Osnovy reologii polimerov i techenie polimerov v kanalakh* (Processing of fiber-forming polymers. Basics of polymer rheology and flow of polymers in channels). Moscow–Izhevsk: NITs “Regulyarnaya i khaoticheskaya dinamika”, Institut komp'yuternykh issledovaniy Publ., 2008, 264 p. (in Russ.).
10. Rao I.J., Rajagopal K.R. The effect of the slip boundary condition on the flow of fluids in a channel. *Acta Mechanica*, 1999, Vol. 135, pp. 113–126. DOI: 10.1007/BF01305747
11. Borzenko E.I., Diakova O.A., Shrager G.R. Studying the slip phenomenon for a viscous fluid flow in a curved channel. *Vestn. Tomsk. Gos. Univ. Mat. Mekh.*, 2014, no. 2(28), pp. 35–44. (in Russ.).
12. Volker J. Slip with friction and penetration with resistance boundary conditions for the Navier–Stokes equation – numerical test s and aspects of the implementation. *J. Computational and Applied Mechanics*, 2002, Vol. 147, Issue 2, pp. 287–300. DOI: 10.1016/s0377-0427(02)00437-5
13. Cannon J.R. The solution of heat equation subject to the specification of energy. *Quart. Appl. Math.*, 1963, Vol. 21, no. 2, pp. 155–160. DOI: 10.1090/qam/160437
14. Ionkin N.I. *Differentsial'nye uravneniya*, 1977, Vol. 13, no. 2, pp. 294–304. (in Russ.).
15. Samarskiy A.A. *Differentsial'nye uravneniya*, 1980, Vol. 16, no. 11, pp. 1925–1935. (in Russ.).
16. Nakhushева V.A. *Differentsial'nye uravneniya matematicheskikh modeley nelokal'nykh protsessov* (Differential equations of mathematical models of nonlocal processes). Moscow, Nauka Publ., 2006, 173 p. (in Russ.).

17. Samarskiy A.A. *Teoriya raznostnykh skhem* (Theory of difference schemes). Moscow, Nauka Publ., 1989, 616 p. (in Russ.).

18. Samarskiy A.A., Vabishchevich P.N. *Chislennye metody resheniya obratnykh zadach matematicheskoy fiziki* (Numerical methods of solving inverse problems of mathematical physics). Moscow, LKI Publ., 2009, 480 p. (in Russ.).

Received July 8, 2016

ОБ ОДНОЙ НЕЛОКАЛЬНОЙ ОБРАТНОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧЕ ДЛЯ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Я.Т. Меграниев, А.Н. Сафарова

Бакинский государственный университет, г. Баку, Азербайджан

E-mail: yashar_aze@mail.ru

Исследуется разрешимость обратной краевой задачи с неизвестным коэффициентом, зависящим от времени, для параболического уравнения второго порядка с неклассическими краевыми условиями. Суть задачи состоит в том, что требуется вместе с решением определить неизвестный коэффициент. Задача рассматривается в прямоугольной области. Дается определение классического решения поставленной задачи. Сначала рассматривается вспомогательная обратная краевая задача и доказывается эквивалентность (в определенном смысле) исходной задачи. Для исследования вспомогательной обратной краевой задачи сначала используется метод разделения переменных. Далее, рассматривается спектральная задача для обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка с интегральными условиями второго рода. После применения формальной схемы метода разделения переменных решение прямой краевой задачи (при заданной неизвестной функции) сводится к решению задачи Коши. После этого решение задачи Коши сводится к решению некоторой счетной системы интегро-дифференциальных уравнений относительно коэффициентов Фурье. В свою очередь, последняя система относительно неизвестных коэффициентов Фурье записывается в виде одного интегро-дифференциального уравнения относительно искомого решения. Затем, используя соответствующие дополнительные условия обратной вспомогательной краевой задачи, для определения неизвестных функций получаем систему двух нелинейных интегральных уравнений. Таким образом, решение вспомогательной обратной краевой задачи сводится к системе двух нелинейных интегро-дифференциальных уравнений относительно неизвестных функций. Строится конкретное банахово пространство. Далее, в шаре из построенного банахового пространства с помощью сжатых отображений доказывается разрешимость системы нелинейных интегро-дифференциальных уравнений, которая также является единственным решением вспомогательной обратной краевой задачи. Используя эквивалентность задач, получены существование и единственность классического решения исходной задачи.

Ключевые слова: обратная краевая задача; параболическое уравнение; метод Фурье; классическое решение.

Введение

Многие задачи математической физики, механики сплошных сред являются краевыми задачами, сводящимися к интегрированию дифференциального уравнения или системы уравнений в частных производных при заданных краевых и начальных условиях. За последнее время в связи с запросами различных технологических процессов, а так же задачами управления движением летательных аппаратов в верхних слоях атмосферы стало актуальным формирование математических моделей этих явлений, содержащих классические краевые условия [1].

Первая работа, содержащая начально-краевую нелокальную задачу для некоторых семейств эллиптических уравнений, исследуется в [2]. В дальнейшем для общих классов эллиптических уравнений, описывающих многие явления естествознания, поставлены пространственно нелокальные задачи и обоснованы методы их решения [3, 4].

В этой работе с помощью метода Фурье и принципа сжатых отображений доказаны существование и единственность решения нелокальной обратной краевой задачи для параболического уравнения второго порядка.

Постановка обратной краевой задачи

Рассмотрим обратную краевую задачу нахождения решения и неизвестного коэффициента параболического уравнения

$$a_1(t)u_t(x,t) + a_0(t)u(x,t) = u_{xx}(x,t) + f(x,t), \quad D_T = \{(x,t) : 0 \leq x \leq 1, 0 \leq t \leq T\}, \quad (1)$$

при условиях:

$$u(x,0) + \delta u(x,T) = \varphi(x) \quad (0 \leq x \leq 1), \quad (2)$$

$$u_x(0,t) = 0 \quad (0 \leq t \leq T), \quad (3)$$

$$du(1,t) + \int_0^1 u(x,t) dx = 0 \quad (0 \leq t \leq T), \quad (4)$$

$$u(0,t) = h(t) \quad (0 \leq t \leq T), \quad (5)$$

где $d > 0, \delta \geq 0$ – заданные числа, $a_1(t) > 0$, $f(x,t)$, $\varphi(x)$, $h(t)$ – заданные функции, а $u(x,t)$ и $a_0(t)$ – искомые функции.

Определение. Пару $\{u(x,t), a_0(t)\}$ функций $u(x,t)$ и $a_0(t)$ будем называть классическим решением задачи (1)–(5), если выполняются следующие условия:

- 1) функция $u(x,t)$ и ее производные $u_t(x,t)$, $u_x(x,t)$, $u_{xx}(x,t)$ непрерывны в D_T ;
 - 2) функция $a_0(t)$ непрерывна на $[0, T]$;
 - 3) уравнение (1) и условия (2)–(5) удовлетворяются в обычном классическом смысле.
- Справедлива следующая лемма.

Лемма 1. Предположим, что $\delta \geq 0$, функция $a_1(t)$ положительна и непрерывна на $[0, T]$, функция $\varphi(x)$ непрерывна на $[0, 1]$, функция $f(x,t)$ непрерывна по совокупности переменных в D_T , $h(t) \in C^1[0, T]$, $h(t) \neq 0$ ($0 \leq t \leq T$). Кроме того, пусть выполняется условие согласования

$$\varphi(0) = h(0) + \delta h(T). \quad (6)$$

Тогда задача нахождения классического решения задачи (1)–(5) эквивалентна задаче определения функций $u(x,t) \in C^{2,1}(D_T)$ и $a_0(t) \in C[0, T]$, из соотношений (1)–(4)

$$a_1(t)h'(t) + a_0(t)h(t) = u_{xx}(0,t) + f(0,t) \quad (0 \leq t \leq T). \quad (7)$$

Доказательство. Пусть $\{u(x,t), a_0(t)\}$ – классическое решение задачи (1)–(5). Предполагая, что $h(t)$ дифференцируема, из (5) получаем:

$$u_t(0,t) = h'(t) \quad (0 \leq t \leq T). \quad (8)$$

Подставляя $x = 0$ в уравнения (1), имеем:

$$a_1(t)u_t(0,t) + a_0(t)u(0,t) = u_{xx}(0,t) + f(0,t) \quad (0 \leq t \leq T). \quad (9)$$

Из последнего соотношения, в силу (5) и (8), получаем, что выполняется (7).

Теперь пусть $\{u(x,t), a_0(t)\}$ – решение задачи (1)–(3), (7), и удовлетворяется условие согласования (6). Из (7) и (9) имеем:

$$a_1(t) \frac{d}{dt}(u(0,t) - h(t)) + a_0(t)(u(0,t) - h(t)) = 0 \quad (0 \leq t \leq T).$$

Примем обозначения

$$y(t) \equiv u(0,t) - h(t) \quad (0 \leq t \leq T) \quad (10)$$

и последнее соотношение перепишем в виде:

$$a_1(t)y'(t) + a_0(t)y(t) = 0 \quad (0 \leq t \leq T). \quad (11)$$

Из (10), с учетом (2) и (6), нетрудно видеть, что

$$y(0) + \delta y(T) = \varphi(0) - (h(0) + \delta h(T)) = 0. \quad (12)$$

Очевидно, что общее решение (11) имеет вид:

$$y(t) = c \exp \left[- \int_0^t \frac{a_0(\tau)}{a_1(\tau)} d\tau \right], \quad (0 \leq t \leq T). \quad (13)$$

Отсюда, с учетом (12), получаем:

$$c \left(1 + \delta \exp \left[- \int_0^T \frac{a_0(\tau)}{a_1(\tau)} d\tau \right] \right) = 0. \quad (14)$$

В силу $\delta \geq 0$ из (14) получим $c = 0$, подставляя его в (13), заключаем, что $y(t) = 0$ ($0 \leq t \leq T$). Следовательно, из (10) ясно, что выполняется и условие (5). Лемма доказана.

Вспомогательная факты

Задача на собственные значения [6]:

$$y''(x) + \lambda y(x) = 0, \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (15)$$

$$y'(0) = 0, \quad y'(1) = d\lambda y(1), \quad d > 0 \quad (16)$$

имеет только собственные функции $y_k(x) = \sqrt{2} \cos(\sqrt{\lambda_k} x)$, $k = 0, 1, \dots$ с неотрицательными собственными числами λ_k из уравнения $\operatorname{tg} \sqrt{\lambda} = -d\sqrt{\lambda}$.

Решая однородную задачу, соответствующую задаче (1)–(4), методом разделения переменных, приходим к спектральной задаче для уравнения (15) с граничными условиями

$$y'(0) = 0, \quad d y(1) + \int_0^1 y(x) dx = 0, \quad d > 0. \quad (17)$$

Ее решением будет система $\{y_k(x)\}_{k=1}^{\infty}$, т. е. система собственных функций задачи (15), (16) без функций, соответствующих собственному значению $\lambda_0 = 0$.

Известно [6], что, начиная с некоторого номера N , имеют место оценки

$$\left| \sqrt{\lambda_k} - \pi/2 - (k-1)\pi \right| < \frac{1}{(d\pi k)}. \quad (18)$$

Сравним систему $\{y_k(x)\}$ без функции $y_0(x)$ с известной системой $\{v_k(x)\}$, $v_k(x) = \sqrt{2} \cos(\sqrt{\mu_k} x)$, где $\sqrt{\mu_k} = \frac{\pi}{2} + \pi(k-1)$, $k = 1, 2, \dots$, которая является ортонормированным базисом в $L_2(0,1)$. Аналогично рассуждениям [5], для $k \geq N$, с учетом (18), имеем

$$\|y_k(x) - v_k(x)\|_{L_2(0,1)}^2 < \frac{2}{3(dk\pi)}.$$

Таким образом,

$$\sum_{k=N}^{\infty} \|y_k(x) - v_k(x)\|_{L_2(0,1)}^2 < \frac{1}{9d^2}, \quad (19)$$

откуда следует сходимость ряда из левой части этого неравенства.

Имеет место следующая лемма.

Лемма 2 [6]. Биортогонально сопряженная система $\{z_k(x)\}$, $k = 1, 2, \dots$ определяется формулой

$$z_k(x) = \sqrt{2} (\cos(\sqrt{\lambda_k} x) - \cos \sqrt{\lambda_k}) / (1 + d \cos^2 \sqrt{\lambda_k}).$$

Теорема 1 [6]. Система $\{y_k(x)\}$, $k = 1, 2, \dots$ образует базис Рисса в пространстве $L_2(0,1)$.

Теперь пусть $\eta_k(x) = \sqrt{2} \sin(\sqrt{\lambda_k} x)$, $\xi_k(x) = \sqrt{2} \sin(\sqrt{\mu_k} x)$, $k = 1, 2, \dots$. Тогда аналогично (19) имеем

$$\sum_{k=N}^{\infty} \|\eta_k(x) - \xi_k(x)\|_{L_2(0,1)}^2 < \frac{1}{9d^2}. \quad (20)$$

Предположим, что $g(x) \in L_2(0,1)$. Тогда соответственно с учетом (19), (20) получаем:

$$\left(\sum_{k=1}^{\infty} \int_0^1 g(x) y_k(x) dx \right)^2 \leq M \|g(x)\|_{L_2(0,1)}, \quad (21)$$

$$\left(\sum_{k=1}^{\infty} \int_0^1 g(x) \eta_k(x) dx \right)^2 \leq M \|g(x)\|_{L_2(0,1)}, \quad (22)$$

где

$$M = \left(N(1+N) + 2 + \frac{1}{9d^2} \right)^{1/2}.$$

Пусть $\varphi(x) \in C[0,1]$, $g'(x) \in L_2(0,1)$ и $J(g) \equiv dg(1) + \int_0^1 g(x)dx = 0$. Тогда имеем

$$g_k = (g(x), z_k(x)) = -\frac{\sqrt{2}}{\alpha_k} \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} \int_0^1 g'(x) \sin(\sqrt{\lambda_k} x) dx, \quad (23)$$

где

$$\alpha_k = 1 + d \cos^2 \sqrt{\lambda_k} > 1.$$

Отсюда, в силу (22), находим

$$\left(\sum_{k=1}^{\infty} (\sqrt{\lambda_k} |g_k|)^2 \right)^{1/2} \leq M \|g'(x)\|_{L_2(0,1)}. \quad (24)$$

Предположим, что $\varphi(x) \in C^1[0,1]$, $g''(x) \in L_2(0,1)$, $J(g) = 0$, $g'(0) = 0$. Тогда из (23) получаем

$$g_k = \frac{\sqrt{2}}{\alpha_k} \frac{1}{\lambda_k} (g'(1) \cos(\sqrt{\lambda_k}) - \int_0^1 g''(x) \cos(\sqrt{\lambda_k} x) dx). \quad (25)$$

В силу (21), из (25), находим

$$\left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k |g_k|)^2 \right)^{1/2} \leq 2m_0 |g'(1)| + \sqrt{2} M \|g''(x)\|_{L_2(0,1)}. \quad (26)$$

Теперь, пусть $g(x) \in W_2^3(0,1)$, $J(g) = 0$, $g'(0) = 0$, $g'(1) + dg''(1) = 0$. Тогда из (24) имеем

$$g_k = \frac{\sqrt{2}}{\alpha_k} \frac{1}{\lambda_k \sqrt{\lambda_k}} \int_0^1 g'''(x) \sin(\sqrt{\lambda_k} x) dx.$$

Отсюда, с учетом (20), находим

$$\left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} |g_k|)^2 \right)^{1/2} \leq M \|g'''(x)\|_{L_2(0,1)}. \quad (27)$$

Теперь введем следующие пространства:

1. Пусть $B_{2,T}^{3/2}$ [7] обозначает совокупность всех функций $u(x,t)$ вида

$$u(x,t) = \sum_{k=1}^{\infty} u_k(t) y_k(x),$$

рассматриваемых в D_T , где функции $u_k(t) \in C[0,T]$, и удовлетворяют условию

$$\left\{ \sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} \|u_k(t)\|_{C[0,T]})^2 \right\}^{1/2} < +\infty.$$

В множестве $B_{2,T}^{3/2}$ норма определяется формулой:

$$\|u(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}} = \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} \|u_k(t)\|_{C[0,T]})^2 \right\}^{1/2}.$$

2. Обозначим топологическое произведение $B_{2,T}^{3/2} \times C[0,T]$ через $E_T^{3/2}$ с нормой

$$\|z\|_{E_T^{3/2}} = \|u(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}} + \|a_0(t)\|_{C[0,T]}.$$

Известно, что эти пространства $B_{2,T}^{3/2}$ и $E_T^{3/2}$ банаховы.

О разрешимости обратной краевой задачи

Формально разыскивая первую компоненту $u(x, t)$ решения $\{u(x, t), a_0(t)\}$ задачи (1)–(3), (7) в виде

$$u(x, t) = \sum_{k=1}^{\infty} u_k(t) y_k(x) \tag{28}$$

приходим к задаче:

$$a_1(t)u'_k(t) + \lambda_k u_k(t) = F_k(t; a_0, u) \quad (k = 1, 2, \dots; 0 \leq t \leq T), \tag{29}$$

$$u_k(0) = \varphi_k, \quad (k = 1, 2, \dots), \tag{30}$$

где

$$u_k(t) = \int_0^1 u(x, t) z_k(x) dx, \quad F_k(t; u, a) = f_k(t) - a_0(t) u_k(t),$$

$$f_k(t) = \int_0^1 f(x, t) z_k(x) dx, \quad \varphi_k = \int_0^1 \varphi(x) z_k(x) dx \quad (k = 1, 2, \dots),$$

причем

$$y_k(x) = \sqrt{2} \cos(\sqrt{\lambda_k} x), \quad z_k(x) = \sqrt{2} (\cos(\sqrt{\lambda_k} x) - \cos(\sqrt{\lambda_k}))/ (1 + d \cos^2 \sqrt{\lambda_k}).$$

Далее, из (29), (30), считая, что $a_1(t) > 0$ и $\delta \geq 0$ находим:

$$u_k(t) = \frac{\varphi_k e^{-\int_0^t \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}}}{1 + \delta e^{-\int_0^T \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}}} + \int_0^t \frac{F_k(\tau; a_0, u)}{a_1(\tau)} e^{-\int_{\tau}^t \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}} d\tau - \frac{\delta e^{-\int_0^T \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}}}{1 + \delta e^{-\int_0^T \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}}} \int_0^T \frac{F_k(\tau; a_0, u)}{a_1(\tau)} e^{-\int_{\tau}^t \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}} d\tau \quad (k = 1, 2, \dots). \tag{31}$$

Для определения первой компоненты $u(x, t)$ решения $\{u(x, t), a_0(t)\}$ задачи (1)–(3), (7) подставляем выражения $u_k(t)$ ($k = 1, 2, \dots$) из (31) в (18):

$$u(x, t) = \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ \frac{\varphi_k e^{-\int_0^t \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}}}{1 + \delta e^{-\int_0^T \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}}} + \int_0^t \frac{F_k(\tau; a_0, u)}{a_1(\tau)} e^{-\int_{\tau}^t \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}} d\tau - \frac{\delta e^{-\int_0^T \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}}}{1 + \delta e^{-\int_0^T \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}}} \int_0^T \frac{F_k(\tau; a_0, u)}{a_1(\tau)} e^{-\int_{\tau}^t \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}} d\tau \right\} y_k(x). \tag{32}$$

Учитывая (28), из (7) находим, что

$$a_0(t) = h^{-1}(t) \left\{ h'(t) - f(0, t) - \sqrt{2} \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k u_k(t) \right\}. \tag{33}$$

Далее, после подстановки выражения $u_k(t)$ из (31) в (33) для определения второй компоненты $a_0(t)$ решения $\{u(x, t), a_0(t)\}$ задачи (1)–(3), (7) получаем:

$$a_0(t) = h^{-1}(t) \left\{ a_1(t) h'(t) - f(0, t) - \sqrt{2} \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \left(\frac{\varphi_k e^{-\int_0^t \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}}}{1 + \delta e^{-\int_0^T \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}}} + \int_0^t \frac{F_k(\tau; a_0, u)}{a_1(\tau)} e^{-\int_{\tau}^t \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}} d\tau - \frac{\delta e^{-\int_0^T \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}}}{1 + \delta e^{-\int_0^T \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}}} \int_0^T \frac{F_k(\tau; a_0, u)}{a_1(\tau)} e^{-\int_{\tau}^t \frac{\lambda_k ds}{a_1(s)}} d\tau \right) \right\}. \tag{34}$$

Теперь докажем следующую лемму.

Лемма 3. Если $\{u(x, t), a_0(t)\}$ является решением задачи (1)–(3), (7), то функции

$$u_k(t) = \int_0^1 u(x,t) z_k(x) dx \quad (k = 1, 2, \dots),$$

т. е. коэффициенты Фурье функции $u(x,t)$ по системе $\{y_k(x)\}, k = 1, 2, \dots$ удовлетворяют на $[0, T]$ счетной системе (31).

Доказательство. Предположим, что $\{u(x,t), a_0(t)\}$ – решение задачи (1)–(3), (7). Тогда очевидно, что

$$2 \int_0^1 u_t(x,t) z_k(x) dx = \frac{d}{dt} \left(2 \int_0^1 u(x,t) dx \right) = u'_k(t) \quad (k = 1, 2, \dots), \quad (35)$$

причем $u_k(t) \in C[0, T]$.

Далее, пользуясь граничным условием (3), дважды интегрируя по частям, находим:

$$\begin{aligned} \int_0^1 u_{xx}(x,t) z_k(x) dx &= \frac{\sqrt{2}}{\alpha_k} \int_0^1 u_{xx}(x,t) (\cos(\sqrt{\lambda_k} x) - \cos \sqrt{\lambda_k}) dx = \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{\alpha_k} (d \lambda_k u(1,t) \cos \sqrt{\lambda_k} + \lambda_k \int_0^1 u_{xx}(x,t) \cos(\sqrt{\lambda_k} x) dx) = \\ &= -\frac{\sqrt{2}}{\alpha_k} \left[\lambda_k (du(1,t) + \int_0^1 u(x,t) dx) \cos \sqrt{\lambda_k} + \right. \\ &\quad \left. + \lambda_k \int_0^1 u(x,t) (\cos(\sqrt{\lambda_k} x) - \cos \sqrt{\lambda_k}) dx \right] = -\lambda_k u_k(t), \end{aligned} \quad (36)$$

где

$$\alpha_k = 1 + d \cos^2 \sqrt{\lambda_k} > 1.$$

Умножив уравнение (1) на функцию $z_k(x)$ ($k = 1, 2, \dots$), проинтегрировав полученное равенство по x от 0 до 1 и учитывая (35), (36), получаем уравнение (29).

Аналогично из (2) получаем, что выполняется условие (30).

Таким образом, $u_k(t)$ ($k = 0, 1, \dots$) является решением задачи (29), (33). А отсюда непосредственно следует, что функции $u_k(t)$ ($k = 0, 1, \dots$) удовлетворяют на $[0, T]$ системе (31). Лемма доказана.

Из леммы 3 вытекает следующее

Следствие. Задача (1)–(3), (7) не может иметь более одного решения, если система (32), (34) имеет единственное решение.

В пространстве $E_T^{3/2}$ рассмотрим оператор

$$\Phi(u, a) = \{\Phi_1(u, a), \Phi_2(u, a)\}.$$

Здесь

$$\Phi_1(u, a) = \tilde{u}(x,t) \equiv \sum_{k=1}^{\infty} \tilde{u}_k(t) \sin \lambda_k x, \quad \Phi_2(u, a) = \tilde{a}_0(t),$$

а $\tilde{u}_k(t)$ ($k = 1, 2, \dots$) и $\tilde{a}_0(t)$ – определяются соответственно из правых частей (31) и (34).

С помощью несложных преобразований находим, что справедливы неравенства:

$$\begin{aligned} \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} \|\tilde{u}_k(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{1/2} &\leq \sqrt{3} \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} |\varphi_k|)^2 \right)^{1/2} + \left\| \frac{1}{a_1(t)} \right\|_{C[0,T]} (1 + \delta) \sqrt{3} \times \\ &\times \left[\sqrt{T} \left(\int_0^T \sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} |f_k(\tau)|)^2 d\tau \right)^{1/2} + T \|a_0(t)\|_{C[0,T]} \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} \|u_k(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{1/2} \right], \end{aligned} \quad (37)$$

$$\begin{aligned} \|\tilde{a}_0(t)\|_{C[0,T]} \leq & \|h^{-1}(t)\|_{C[0,T]} \left\{ \|a_1(t)h'(t) - f(0,t)\|_{C[0,T]} + \sqrt{2} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-1} \right)^{1/2} \left[\left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} |\varphi_k|)^2 \right)^{1/2} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \left\| \frac{1}{a_1(t)} \right\|_{C[0,T]} (1+\delta) \left(\sqrt{T} \left(\int_0^T \sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} |f_k(\tau)|)^2 d\tau \right)^{1/2} + T \|a_0(t)\|_{C[0,T]} \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} \|u_k(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{1/2} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (38)$$

Предположим, что данные задачи (1)–(3), (7) удовлетворяют следующим условиям:

1. $\varphi(x) \in W_2^{(3)}(0,1)$, $d\varphi(1) + \int_0^1 \varphi(x) dx = 0$, $\varphi'(0) = 0$, $\varphi'(1) + d\varphi''(1) = 0$;
2. $f(x,t)$, $f_x(x,t)$, $f_{xx}(x,t) \in C(D_T)$, $f_{xxx}(x,t) \in L_2(D_T)$,
 $df(1,t) + \int_0^1 f(x,t) dx = 0$, $f_x(0,t) = 0$, $f_x(1,t) + df_{xx}(1,t) = 0$ ($0 \leq t \leq T$);
3. $h(t) \in C^1[0,T]$, $h(t) \neq 0$ ($0 \leq t \leq T$).

В силу (25) и (27), из (37) и (38) соответственно находим:

$$\|\tilde{u}(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}} \leq A_1(T) + B_1(T)T \|a_0(t)\|_{C[0,T]} \|u(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}}, \quad (39)$$

$$\|\tilde{a}(t)\|_{C[0,T]} \leq B_1(T) + B_2(T)T \|a_0(t)\|_{C[0,T]} \|u(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}}, \quad (40)$$

где

$$\begin{aligned} A_1(T) = & \sqrt{3}M \left[\|\varphi'''(x)\|_{L_2(0,1)} + \left\| \frac{1}{a_1(t)} \right\|_{C[0,T]} (1+\delta) \sqrt{T} \|f_{xxx}(x,t)\|_{L_2(D_T)} \right], B_1(T) = \sqrt{3} \left\| \frac{1}{a_1(t)} \right\|_{C[0,T]} (1+\delta), \\ A_2(T) = & \|h^{-1}(t)\|_{C[0,T]} \left\{ \|a_1(t)h'(t) - f(0,t)\|_{C[0,T]} + \sqrt{2} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-1} \right)^{1/2} \left[M \|\varphi'''(x)\|_{L_2(0,1)} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \left\| \frac{1}{a_1(t)} \right\|_{C[0,T]} (1+\delta) \sqrt{T} \|f_{xxx}(x,t)\|_{L_2(D_T)} \right] \right\}, B_2(T) = \|h^{-1}(t)\|_{C[0,T]} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{-2} \right)^{1/2}. \end{aligned}$$

Введя обозначения

$$A(T) = A_1(T) + A_2(T), \quad B(T) = B_1(T) + B_2(T)$$

из неравенств (39), (40), получаем

$$\|\tilde{u}(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}} + \|\tilde{a}(t)\|_{C[0,T]} \leq A(T) + B(T)T \|a_0(t)\|_{C[0,T]} \|u(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}}. \quad (41)$$

Таким образом, справедлива следующая

Теорема 2. Предположим, что выполняются условия 1–3 и неравенство

$$(A(T) + 2)^2 B(T) < 1. \quad (42)$$

Тогда в шаре $K = K_R(\|z\|_{E_T^{3/2}} \leq R = A(T) + 2)$ из $E_T^{3/2}$ задача (1)–(3), (7) имеет единственное решение.

Доказательство. Запишем систему уравнений (32), (34) в виде

$$z = \Phi z, \quad (43)$$

где $z = \{u, a_0\}$, $\Phi z = \{\Phi_1 z, \Phi_2 z\}$, а $\Phi_i(u, a_0)$ ($i=1,2$) определены правыми частями уравнений (32), (34) соответственно.

Оператор $\Phi(u, a_0)$ рассмотрим в шаре $K = K_R(\|z\|_{E_T^{3/2}} \leq R = A(T) + 2)$ пространства $E_T^{3/2}$.

Аналогично (41) получаем, что для любых $z, z_1, z_2 \in K_R$ справедливы оценки:

$$\|\Phi z\|_{E_T^{3/2}} \leq A(T) + B(T)T \|a_0(t)\|_{C[0,T]} \|u(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}}, \quad (44)$$

$$\|\Phi z_1 - \Phi z_2\|_{E_T^{3/2}} \leq B(T)TR \left(\|a_{01}(t) - a_{02}(t)\|_{C[0,T]} + \|u_1(x,t) - u_2(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}} \right). \quad (45)$$

Из неравенств (44) и (45), в силу (42), следует, что оператор Φ является в шаре $K = K_R$ сжатым. Следовательно, оператор Φ имеет в шаре $K = K_R$ единственную неподвижную точку $\{u, a_0\}$, которая является единственным решением уравнения (43). Очевидно, что это решение также является единственным решением системы (32), (34) в шаре $K = K_R$.

Из структуры пространства $B_{2,T}^{3/2}$ следует, что функции $u(x,t)$, $u_x(x,t)$ и $u_{xx}(x,t)$ непрерывны в области D_T .

В силу (24) из (29) легко заметить, что

$$\left(\sum_{k=1}^{\infty} (\sqrt{\lambda_k} \|u'_k(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{1/2} \leq \sqrt{3} \left\| \frac{1}{a_1(t)} \right\|_{C[0,T]} \left\{ \left(\sum_{k=1}^{\infty} (\lambda_k \sqrt{\lambda_k} \|u_k(t)\|_{C[0,T]})^2 \right)^{1/2} + M \left\| \|f_x(x,t)\|_{C[0,T]} \right\|_{L_2(0,1)} + \|a_0(t)\|_{C[0,T]} \|u(x,t)\|_{B_{2,T}^{3/2}} \right\}.$$

Из последнего соотношения следует, что $u_t(x,t)$ непрерывна в D_T .

Нетрудно проверить, что уравнение (1) и условия (2)–(4) и (7) выполняются в обычном смысле. Таким образом, решением задачи (1)–(3), (7) является пара функций $\{u(x,t), a_0(t)\}$. В силу следствия леммы 3 оно единственно в шаре $K = K_R$. Теорема доказана.

С помощью леммы 1 и теоремы 2 получаем однозначную разрешимость задачи (1)–(5).

Теорема 3. Пусть выполнены условия теоремы 2, и удовлетворяются условия согласования $\varphi(0) = h(0)$, $\psi(0) = h'(T)$.

Тогда в шаре $K = K_R$ ($\|z\|_{E_T^{3/2}} \leq R = A(T) + 2$) из пространства $E_T^{3/2}$ задача (1)–(5) имеет единственное классическое решение.

Литература

1. Гордезиани, Д.Г. Решения нелокальных задач для одномерных колебаний среды / Д.Г. Гордезиани, Г.А. Авалишвили // Математическое моделирование. – 2000. – Т. 12, № 1. – С. 94–103.
2. Бицадзе, А.В. О некоторых простейших обобщенных линейных эллиптических задач / А.В. Бицадзе, А.А. Самарский. – ДАН СССР. – 1969. – Т. 85, № 4. – С. 739–740.
3. Гордезиани, Д.Г. Об одном методе решения краевой задачи Бицадзе–Самарского / Д.Г. Гордезиани // Семинар Института прикладной математики при Тбилисском университете. – 1970. – № 2. – С. 38–40.
4. Гордезиани, Д.Г. О разрешимости одной краевой задачи для нелинейного уравнения эллиптического типа / Д.Г. Гордезиани, Д.З. Джигоев. – Сообщ. АН ГССР. – 1972. – Т. 68, № 4. – С. 289–292.
5. Капустин, Н.Ю. О сходимости спектральных разложений функций из класса Гельдера для двух задач со спектральным параметром в граничном условии / Н.Ю. Капустин, Е.И. Моисеев // Дифференциальные уравнения. – 2000. – Т. 36, № 8. – С. 1069–1074.
6. Моисеев, Е.И. Об особенностях корневого пространства одной спектральной задачи со спектральным параметром в граничном условии / Е.И. Моисеев, Н.Ю. Капустин // Докл. АН. – 2002. – Т. 385, № 1. – С. 20–24.
7. Худавердиев, К.И. Исследование одномерной смешанной задачи для одного класса псевдогиперболических уравнений третьего порядка с нелинейной операторной правой частью / К.И. Худавердиев, А.А. Велиев. – Баку: Чашыюглы, 2010. – 168 с.

Поступила в редакцию 15 ноября 2016 г.

ON ONE NONLOCAL INVERSE BOUNDARY PROBLEM FOR THE SECOND-ORDER PARABOLIC EQUATION

Ya.T. Mehraliev, A.N. Safarova

Baku State University, Baku, Azerbaijan

E-mail: yashar_aze@mail.ru

The paper is focused on solvability of an inverse boundary problem with an unknown coefficient which depends on time for a second-order parabolic equation with non-classical boundary conditions. The idea of the problem is that together with the solution it is required to determine the unknown coefficient. The problem is considered in the rectangular area. The paper introduces a classical solution of the set problem. At first, an auxiliary inverse boundary problem is examined and the equivalence (in some sense) of the original problem is proved. First, we apply a method of variable separation to analyze the auxiliary inverse boundary problem. Then, we examine a spectral problem for an ordinary second-order differential equation with integral conditions. Having used a formal scheme of the method of variable separation, the solution of a direct boundary problem (in case of specified unknown function) resolves itself into solution of Cauchy problem. After that the solution is limited to the solution of a countable system of integro-differential equations in Fourier coefficients. In its turn, the last system regarding unknown Fourier coefficients is recorded in the form of an integro-differential equation in the desired solution. Using relevant additional conditions of the auxiliary inverse boundary problem, we obtain a system of two nonlinear integral equations for defining unknown functions. Thus, the solution of the auxiliary inverse boundary problem comes down to the system of two nonlinear integro-differential equations in unknown functions. The specific Banach space is designed. Then, in the sphere made of the Banach space we with the help of contracted mapping prove the solvability of the nonlinear integro-differential equations set, which is a unique solution of the additional inverse boundary problem. Using the equivalence of problems, it is concluded about existence and uniqueness of a classical solution of the original problem.

Keywords: inverse boundary problem; parabolic equation; Fourier method; classical solution.

References

1. Gordeziani D.G., Avalishvili G.A. *Matematicheskoe modelirovanie*, 2000, Vol. 12, no. 1, pp. 94–103. (in Russ.).
2. Bitsadze A.V., Samarskiy A.A. *DAN SSSR*, 1969, Vol. 85, no. 4, pp. 739–740. (in Russ.).
3. Gordeziani D.G. *Seminar Instituta prikladnoy matematiki pri Tbilisskom universitete* (Seminar of the Institute of Applied Mathematics at Tbilisi University), 1970, no. 2, p. 38–40. (in Russ.).
4. Gordeziani D.G., Dzhioev D.Z. O razreshimosti odnoy kraevoy zadachi dlya nelineynogo uravneniya ellipticheskogo tipa (On the solvability of a boundary value problem for a nonlinear equation of elliptic type). *Soobshch. AN GSSR* (Communication of AN GSSR), 1972, Vol. 68, no. 4, pp. 289–292. (in Russ.).
5. Kapustin N.Yu., Moiseev E.I. Convergence of spectral expansions for functions of the hölder class for two problems with a spectral parameter in the boundary condition. *Differential Equations*, 2000, Vol. 36, Issue 8, pp. 1182–1188. DOI:10.1007/BF02754186
6. Moiseev E.I., Kapustin N.Yu. *Doklady akademii nauk*, 2002, Vol. 385, no. 1, pp. 20–24. (in Russ.).
7. Khudaverdiev K.I., Veliev A.A. *Issledovanie odnomernoy smeshannoy zadachi dlya odnogo klassa psevdogiperbolicheskikh uravneniy tret'ego poryadka s nelineynoy operatornoy pravoy chast'yu* (The study of one-dimensional mixed problem for one class of quasi-hyperbolic third-order equations with a nonlinear operator right side). Baku, Chashyogly Publ., 2010, 168 p. (in Russ.).

Received November 15, 2016

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ ФИЛЬТРАЦИИ ГАЗА В ПЛАСТЕ С УЧЕТОМ РАЗЛОЖЕНИЯ ГИДРАТА

Н.Г. Мусакаев¹, С.Л. Бородин¹, Д.С. Бельских²

¹ Тюменский филиал Института теоретической и прикладной механики им. С.А. Христиановича СО РАН, г. Тюмень, Российская Федерация

² Тюменский государственный университет, г. Тюмень, Российская Федерация

E-mail: bedeser@yandex.ru

Осуществлена постановка задачи о нагнетании в пористый пласт, изначально заполненный газом и гидратом, теплого газа. Для решения данной задачи разработана математическая модель неизотермической фильтрации газа с учетом диссоциации газового гидрата. Построен алгоритм, в котором используются неявная разностная схема, метод прогонки и метод простых итераций. Предложен метод для расчета гидратонасыщенности, который можно использовать для решения других задач с фазовыми переходами.

Ключевые слова: неизотермическая фильтрация газа; газовый гидрат; численный метод; фазовый переход.

Введение

В настоящее время углеводороды являются одним из важнейших источников для энергетики и практическим незаменимым сырьем для химической промышленности. В связи с этим ведутся исследования в области поиска и разработки новых, нетрадиционных источников углеводородов, одним из которых особый интерес представляют гидраты природного газа [1, 2]. Запасы углеводородов в гидратах огромны – специалисты сходятся на том, что в скоплениях природных газовых гидратов содержится примерно 20 000 трлн. м³ метана (для примера в традиционных извлекаемых запасах – 250 трлн. м³) [3]. Таким образом, задачи, связанные с добычей метана из газовых гидратов являются чрезвычайно перспективными.

Для решения практических задач требуется теоретическая проработка, основывающаяся на адекватных математических моделях и численных методах их реализации. В настоящей работе предложена математическая модель неизотермической фильтрации газа, а также разработан алгоритм решения уравнений этой модели, который включает в себя авторский метод расчёта гидратонасыщенности. Наибольший интерес представляет именно расчет гидратонасыщенности, так как уравнения неизотермической фильтрации газа без учета фазовых переходов решаются относительно легко, а учет фазового перехода создает значительные вычислительные сложности. Например, одним из авторов проводилось сравнение численных методов решения задачи Стефана о фазовом переходе [4], и ни один из семи рассматривавшихся в этой работе методов не подходит для расчета процесса разложения/образования гидрата в пласте. Поэтому предложен метод, который позволяет решать такую задачу, причем он является универсальным – подходит и для многомерных, и для многофронтных задач Стефана, а также для задач с протяженной областью фазовых переходов.

Математическая модель

Построим математическую модель неизотермической фильтрации газа с учетом фазового перехода «гидрат метана \leftrightarrow метан + вода». При этом будем рассматривать нагнетание газа (метана) в однородный горизонтальный пористый пласт постоянной толщины. Данная залежь в исходном состоянии заполнена газом (одноименный закачиваемому) и его гидратом, давление p_0 и температура T_0 которых соответствуют термодинамическим условиям их существования в свободном состоянии. Температура нагнетаемого в пласт газа T_e является постоянной величиной и $T_e > T_0$.

Примем следующие допущения: гидрат является двухкомпонентной системой с массовой концентрацией газа G ; кровля и подошва пласта непроницаемы; температуры газа, жидкости,

гидрата и пористой среды в каждой точке пласта совпадают (однотемпературная модель). Положим, что пористость пласта m постоянна, скелет пористой среды, газовый гидрат и вода несжимаемы и неподвижны [2, 5].

Запишем уравнения сохранения массы для газа, воды и гидрата [2]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(mS_g\rho_g) + \operatorname{div}(mS_g\rho_g\vec{v}_g) = J_{h \rightarrow g} = GJ, \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(mS_w\rho_w) = J_{h \rightarrow w} = (1-G)J, \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(mS_h\rho_h) = -J_{h \rightarrow g} - J_{h \rightarrow w} = -J, \quad (3)$$

$$S_w + S_h + S_g = 1, \quad (4)$$

где S_i ($i = g, w, h$) – насыщенность поры i -ой фазой; ρ_i ($i = g, w, h$) – плотность i -ой фазы; v_g – скорость газа, J – интенсивность разложения гидрата; параметры газа, воды и гидрата снабжены индексами g, w и h соответственно.

Скорость фильтрации газа удовлетворяет уравнению Дарси

$$mS_g\vec{v}_g = -\frac{k_g}{\mu_g}(\operatorname{grad} p - \rho_g\vec{g}), \quad (5)$$

где k_g – проницаемость по газу; μ_g – вязкость газа; p – давление; g – ускорение свободного падения.

Для газа примем следующие уравнения состояния и коэффициента сверхсжимаемости z [6]:

$$p = z\rho_gRT, \quad (6)$$

$$z = \left(0,41\lg\left(\frac{T}{T_c}\right) + 0,73\right)^{\frac{p}{p_c}} + 0,1\frac{p}{p_c}, \quad (7)$$

где R – удельная газовая постоянная; T – температура; p_c, T_c – критические давление и температура газа.

Запишем уравнение энергии в общем виде [7] с учетом фазового перехода:

$$\rho c \frac{\partial T}{\partial t} + \rho_g c_g m S_g \vec{v} \left(\operatorname{grad} T + \varepsilon_i \operatorname{grad} p - \frac{\vec{g}}{c_g} \right) - \rho_g c_g m S_g \eta_s \frac{\partial p}{\partial t} = \operatorname{div}(\lambda \operatorname{grad} T) + m \rho_h L_h \frac{\partial S_h}{\partial t}, \quad (8)$$

$$\varepsilon_i = -\frac{1}{\rho_g c_g} \frac{T}{z} \left(\frac{\partial z}{\partial T} \right)_p, \quad \eta_s = \frac{1}{\rho_g c_g} - \varepsilon_i,$$

$$\rho c = (1-m)\rho_{sk}c_{sk} + m(S_g\rho_g c_g + S_w\rho_w c_w + S_h\rho_h c_h),$$

$$\lambda = (1-m)\lambda_{sk} + m(S_g\lambda_g + S_w\lambda_w + S_h\lambda_h).$$

Здесь L_h – теплота разложения газового гидрата; ε_i – коэффициент Джоуля–Томпсона, η_s – коэффициент адиабатического охлаждения; ρ_{sk} – плотность скелета пористой среды; c_i и λ_i ($i = sk, g, w, h$) – удельная теплоёмкость и коэффициент теплопроводности скелета, газа, воды и гидрата, соответственно.

Рассмотрим задачу в одномерной плоскопараллельной постановке. Тогда после преобразований уравнений (1)–(6) и (8) получим следующую систему:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = \frac{p}{T} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{p}{z} \frac{\partial z}{\partial t} - \frac{p}{S_g} \frac{\partial S_g}{\partial t} + \frac{zRT}{S_g} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\left(\frac{\rho_g k_g}{m\mu_g} \right) \frac{\partial p}{\partial x} \right] - \frac{p}{S_g} \frac{\rho_h}{\rho_g} G \frac{\partial S_h}{\partial t}, \quad (9)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\rho_g c_g}{\rho c} \cdot \left(\frac{k_g}{\mu_g} \frac{\partial p}{\partial x} \frac{\partial T}{\partial x} + \varepsilon_i \frac{k_g}{\mu_g} \left(\frac{\partial p}{\partial x} \right)^2 + m S_g \eta_s \frac{\partial p}{\partial t} \right) + \frac{1}{\rho c} \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \frac{m \rho_h L_h}{\rho c} \frac{\partial S_h}{\partial t}, \quad (10)$$

$$S_w = S_{w0} + \frac{\rho_h}{\rho_w} (1-G)(S_{h0} - S_h). \quad (11)$$

Математика

Зададим начальные и граничные условия для задачи закачки теплого газа в пласт, изначально содержащий газ и его гидрат:

$$t = 0, x_w \leq x \leq L: \quad p = p_0, T = T_0, S_h = S_{h0}, S_w = 0, S_g = 1 - S_{h0}; \quad (12)$$

$$t > 0: \quad \begin{cases} x = x_w: & p = p_e, T = T_e; \\ x = L: & \frac{\partial p}{\partial x} = 0, \frac{\partial T}{\partial x} = 0. \end{cases} \quad (13)$$

Здесь x_w – радиус скважины, L – длина пласта, p_0, T_0 – начальные давление и температура в пласте, S_{h0} – начальная гидратонасыщенность, p_e – давление на забое скважины, T_e – температура закачиваемого газа.

Уравнения (9)–(11), уравнение Латонова–Гуревича для сверхсжимаемости (7) и уравнение (4) для расчета газонасыщенности образуют систему, которая позволяет рассчитывать распределения давления, температуры, насыщенностей и других параметров в пласте при неизотермической фильтрации газа, которая сопровождается разложением или образованием гидрата. В данной системе 5 уравнений и 6 неизвестных, поэтому для ее замыкания используется описанный далее численный метод решения, который заключается в расчете гидратонасыщенности, исходя из следующих лимитирующих условий:

- при разложении гидрата давление повышается, пока не достигнет равновесного давления или не разложится весь гидрат;
- при разложении гидрата температура понижается, пока не достигнет равновесной температуры или не разложится весь гидрат;
- при образовании гидрата давление уменьшается, пока не достигнет равновесного давления или не закончатся все фазы образователи гидрата (в данном случае – вода и газ);
- при образовании гидрата температура повышается, пока не достигнет равновесной температуры или не закончатся все фазы образователи гидрата.

Данные условия служат для уточнения итерационных параметров, которые подставляются в уравнения (4), (7), (9)–(11) до тех пор, пока не будет достигнута приемлемая погрешность. Алгоритм решения подробно описан далее.

Алгоритм решения

В работе при численной реализации математической модели были использованы неявная разностная схема, метод прогонки, метод простых итераций и новый метод для расчета гидратонасыщенности. Дискретные аналоги уравнений (9) и (10) могут быть представлены в следующем виде:

$$\frac{p_i^{k+1} - p_i^k}{\Delta t} = \frac{p_i^{k+1}}{T_i^{k+1}} \cdot \frac{T_i^{k+1} - T_i^k}{\Delta t} + \frac{p_i^{k+1}}{z_i^{k+1}} \cdot \frac{z_i^{k+1} - z_i^k}{\Delta t} - \frac{p_i^{k+1}}{(S_g)_i^{k+1}} \cdot \frac{(S_g)_i^{k+1} - (S_g)_i^k}{\Delta t} + \frac{z_i^{k+1} \cdot R \cdot T_i^{k+1}}{(S_g)_i^{k+1}} \cdot \frac{1}{\Delta x} \times \quad (14)$$

$$\times \left[\left(\frac{\rho_g k_g}{m \mu_g} \right)_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} \cdot \frac{p_{i+1}^{k+1} - p_i^{k+1}}{\Delta x} - \left(\frac{\rho_g k_g}{m \mu_g} \right)_{i-\frac{1}{2}}^{k+1} \cdot \frac{p_i^{k+1} - p_{i-1}^{k+1}}{\Delta x} \right] - \frac{p_i^{k+1}}{(S_g)_i^{k+1}} \cdot \frac{\rho_h}{(\rho_g)_i^{k+1}} G \cdot \frac{(S_h)_i^{k+1} - (S_h)_i^k}{\Delta t};$$

$$\frac{T_i^{k+1} - T_i^k}{\Delta t} = \left(\frac{\rho_g c_g}{\rho c} \right)_i^{k+1} \left(\frac{k_g}{\mu_g} \right)_i^{k+1} \left[\frac{p_{i+1}^{k+1} - p_i^{k+1}}{\Delta x} \right] \left[\frac{T_{i+1}^{k+1} - T_i^{k+1}}{\Delta x} + (\varepsilon_i)^{k+1} \left(\frac{p_{i+1}^{k+1} - p_i^{k+1}}{\Delta x} \right) \right] + \quad (15)$$

$$+ \left(\frac{\rho_g c_g}{\rho c} \right)_i^{k+1} m (S_g)_i^{k+1} (\eta_s)_i^{k+1} \frac{p_i^{k+1} - p_i^k}{\Delta t} + \frac{m \rho_h L_h}{(\rho c)_i^{k+1}} \cdot \frac{(S_h)_i^{k+1} - (S_h)_i^k}{\Delta t} +$$

$$+ \frac{1}{(\rho c)_i^{k+1}} \cdot \frac{1}{\Delta x} \left[\lambda_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} \frac{T_{i+1}^{k+1} - T_i^{k+1}}{\Delta x} - \lambda_{i-\frac{1}{2}}^{k+1} \frac{T_i^{k+1} - T_{i-1}^{k+1}}{\Delta x} \right].$$

Здесь верхние индексы относятся к шагу по времени, а нижние – по пространству. Для решения системы с помощью метода прогонки необходимо уравнения (14) и (15) привести к специальному виду

$$A_p \cdot p_{i-1}^{k+1} + C_p \cdot p_i^{k+1} + B_p \cdot p_{i+1}^{k+1} = F_p, \quad A_T \cdot T_{i-1}^{k+1} + C_T \cdot T_i^{k+1} + B_T \cdot T_{i+1}^{k+1} = F_T,$$

где коэффициенты A_j, B_j, C_j ($j = p, T$) выражаются следующим образом:

$$A_p = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \cdot \frac{z_i^{k+1} \cdot R \cdot T_i^{k+1}}{(S_g)_i^{k+1}} \cdot \left(\frac{\rho_g k_g}{m \mu_g} \right)_{i-\frac{1}{2}}^{k+1}, \quad B_p = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \cdot \frac{z_i^{k+1} \cdot R \cdot T_i^{k+1}}{(S_g)_i^{k+1}} \cdot \left(\frac{\rho_g k_g}{m \mu_g} \right)_{i+\frac{1}{2}}^{k+1},$$

$$C_p = -\frac{T_i^k}{T_i^{k+1}} - \frac{z_i^k}{z_i^{k+1}} + \frac{(S_g)_i^k}{(S_g)_i^{k+1}} - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \cdot \frac{z_i^{k+1} \cdot R \cdot T_i^{k+1}}{(S_g)_i^{k+1}} \cdot \left\{ \left(\frac{\rho_g k_g}{m \mu_g} \right)_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} + \left(\frac{\rho_g k_g}{m \mu_g} \right)_{i-\frac{1}{2}}^{k+1} \right\} -$$

$$-\frac{\rho_h G}{(S_g)_i^{k+1} (\rho_g)_i^{k+1}} \left[(S_h)_i^{k+1} - (S_h)_i^k \right],$$

$$F_p = -p_i^k;$$

$$A_T = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \cdot \frac{\lambda_{i-\frac{1}{2}}^{k+1}}{(\rho c)_i^{k+1}}, \quad B_T = \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \cdot \left[\frac{\lambda_{i+\frac{1}{2}}^{k+1}}{(\rho c)_i^{k+1}} + \left(\frac{\rho_g c_g}{\rho c} \right)_i^{k+1} \left(\frac{k_g}{\mu_g} \right)_i^{k+1} (p_{i+1}^{k+1} - p_i^{k+1}) \right],$$

$$C_T = -1 - \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} \cdot \left[\left(\frac{\rho_g c_g}{\rho c} \right)_i^{k+1} \left(\frac{k_g}{\mu_g} \right)_i^{k+1} (p_{i+1}^{k+1} - p_i^{k+1}) + \frac{1}{(\rho c)_i^{k+1}} \left(\lambda_{i-\frac{1}{2}}^{k+1} + \lambda_{i+\frac{1}{2}}^{k+1} \right) \right],$$

$$F_T = -T_i^k - \left(\frac{\rho_g c_g}{\rho c} \right)_i^{k+1} \left[(\varepsilon_i)_i^{k+1} \cdot \left(\frac{k_g}{\mu_g} \right)_i^{k+1} \frac{\Delta t}{(\Delta x)^2} (p_{i+1}^{k+1} - p_i^{k+1})^2 + m (S_g)_i^{k+1} (\eta_s)_i^{k+1} (p_i^{k+1} - p_i^k) \right] -$$

$$\frac{m \rho_h L_h (S_h)_i^{k+1} - (S_h)_i^k}{(\rho c)_i^{k+1} \Delta t}.$$

Для решения полученной системы методом прогонки нам необходимо переписать граничные условия (13), зная следующие зависимости

$$\left\{ \alpha_{i+1}^j = \frac{-B_j}{A_j \cdot \alpha_i^j + C_j}, \beta_{i+1}^j = \frac{F_j - A_j \cdot \beta_i^j}{A_j \cdot \alpha_i^j + C_j} \right\},$$

где $j = p, T$ при этом:

$$T_i^{k+1} = \alpha_{i+1}^T \cdot T_{i+1}^{k+1} + \beta_{i+1}^T, \quad p_i^{k+1} = \alpha_{i+1}^p \cdot p_{i+1}^{k+1} + \beta_{i+1}^p.$$

Исходя из описанного выше, мы можем узнать значения начальных коэффициентов α_1 и β_1 , а также значения температуры и давления в последней точке расчетной области:

$$\left\{ \alpha_1^T = 0, \beta_1^T = T_e, \left\{ T_N^{k+1} = \frac{-\beta_N^T}{\alpha_N^T - 1}, p_N^{k+1} = \frac{-\beta_N^p}{\alpha_N^p - 1} \right\} \right\}.$$

Запишем дискретный аналог для уравнения (7):

$$z_i^{k+1} = \left(0,4 \cdot \lg \frac{T_i^{k+1}}{T_c} + 0,73 \right)^{p_i^{k+1}/p_c} + 0,1 \cdot \frac{p_i^{k+1}}{p_c}. \quad (16)$$

Порядок численного решения следующий:

1. Методом прогонки находятся значения давления в узлах пространственной сетки на новом временном шаге, используя уравнение (14). При этом используются итерационные значения ко-

Математика

эфициента сверхсжимаемости, температуры, гидрато- и газонасыщенности. Параметры, которые зависят от давления, например, плотность газа, определяются с использованием итерационного значения давления.

2. Рассчитывается значение коэффициента сверхсжимаемости газа из соотношения (16), используя определенные в 1-ом пункте значения давления и итерационные температуры.

3. Методом прогонки вычисляются значения температуры в узлах пространственной сетки на новом временном шаге из уравнения (15). При этом используются значения давления, найденные в пункте 1, коэффициента сверхсжимаемости – в пункте 2 и итерационные значения гидрато-, водо- и газонасыщенности. Параметры, которые зависят от температуры (например, плотность газа), определяются на основе итерационного значения температуры.

4. Для расчета гидратонасыщенности, во-первых, вычисляются значения равновесной температуры и давления фазового перехода для уже найденных в пунктах 1–3 величин давления, коэффициента сверхсжимаемости и температуры, используя корреляцию Хафермана–Миллера [8]

$$\left\{ T_h = \frac{B_1}{\left(A_1 - \ln \left(\frac{p_i^{k+1} \cdot z_i^{k+1}}{10^6} \right) \right)}, p_h = \exp \left(A_1 - \frac{B_1}{T_i^{k+1}} \right) \cdot \frac{10^6}{z_i^{k+1}} \right\};$$

где размерность давления – МПа; размерность температуры – К; T_h, p_h – равновесные температура и давление; A_1, B_1 – эмпирические коэффициенты, имеющие различные значения для двух диапазонов температур, в зависимости от того, на какие фазы разлагается (из каких фаз образуется) гидрат (газ и лед, либо газ и вода):

$$250 \leq T \leq 272,95: A_1 = 8,486; B_1 = 2\,087,40;$$

$$272,95 \leq T \leq 287: A_1 = 25,659; B_1 = 6\,774,09.$$

Если термодинамические условия допускают разложение гидрата, т. е. $(T_i^{k+1})^{new} > T_h$ и гидрат есть $((S_h)_i^{iter} > 0)$, то рассчитываем максимальное количество гидрата, которое может разложиться:

$$\Delta S_h = \min \left\{ \Delta S_h^T = (T_i^{k+1} - T_h) \frac{(\rho c)_i^{k+1}}{m \rho_h L_h}, \Delta S_h^p = (p_h - p_i^{k+1}) \frac{(S_g)_i^{iter} (\rho_g)_i^{k+1}}{G \rho_h p_i^{k+1}}, (S_h)_i^{iter} \right\},$$

тогда гидратонасыщенность на новом шаге

$$(S_h)_i^{k+1} = (S_h)_i^{iter} - \Delta S_h.$$

Если термодинамические условия допускают образование гидрата, т. е. $(T_i^{k+1})^{new} < T_h$ и есть гидратообразователи $((S_w)_i^{iter} > 0$ и $(S_g)_i^{iter} > 0)$, то рассчитываем максимальное количество гидрата, которое может образоваться:

$$\Delta S_h = \min \left\{ \Delta S_h^T = (T_h - T_i^{k+1}) \frac{(\rho c)_i^{k+1}}{m \rho_h L_h}, \Delta S_h^p = (p_i^{k+1} - p_h) \frac{(S_g)_i^{iter} (\rho_g)_i^{k+1}}{G \rho_h p_i^{k+1}}, \Delta S_h^w = \frac{(S_w)_i^{iter} \rho_w}{1 - G \rho_h} \right\},$$

тогда гидратонасыщенность на новом шаге:

$$(S_h)_i^{k+1} = (S_h)_i^{iter} + \Delta S_h.$$

5. Рассчитываются значения водонасыщенности из дискретного аналога уравнения (11):

$$(S_w)_i^{k+1} = (S_w)_i^k + \frac{\rho_h}{\rho_w} (1 - G) \left((S_h)_i^k - (S_h)_i^{k+1} \right).$$

6. Рассчитываются значения газонасыщенности, используя уравнение (4):

$$(S_g)_i^{k+1} = 1 - (S_w)_i^{k+1} - (S_h)_i^{k+1}.$$

7. Определяется относительная погрешность итерации:

$$\delta = \max_{\forall i} \left\{ \left| \frac{p_i^{iter} - p_i^{k+1}}{p_i^{k+1}} \right|; \left| \frac{z_i^{iter} - z_i^{k+1}}{z_i^{k+1}} \right|; \left| \frac{T_i^{iter} - T_i^{k+1}}{T_i^{k+1}} \right|; \left| \frac{(S_g)_i^{iter} - (S_g)_i^{k+1}}{(S_g)_i^{k+1}} \right| \right\}.$$

Новое итерационное приближение:

$$\forall i: p_i^{iter} = p_i^{k+1}; z_i^{iter} = z_i^{k+1}; T_i^{iter} = T_i^{k+1};$$

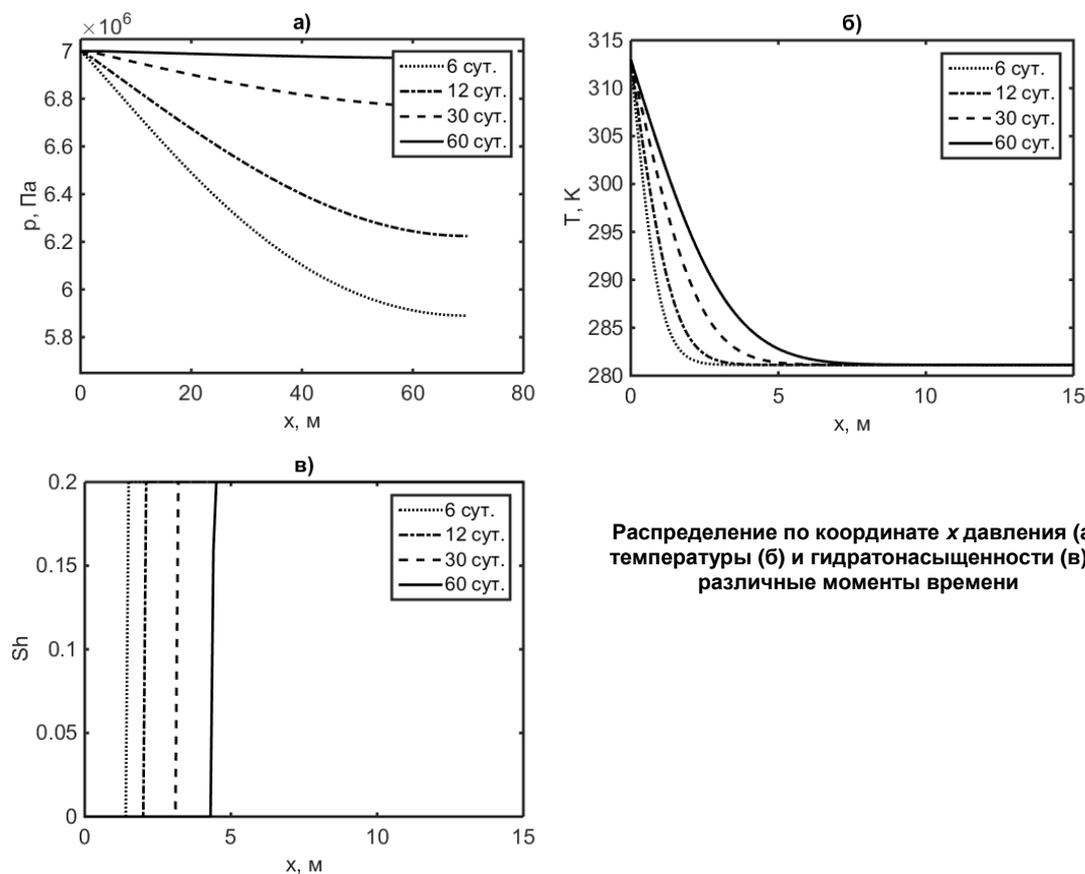
$$(S_h)_i^{iter} = (S_h)_i^{k+1}; (S_g)_i^{iter} = (S_g)_i^{k+1}; (S_w)_i^{iter} = (S_w)_i^{k+1}.$$

Если погрешность итерации $\delta > \varepsilon$ (где ε – малая величина задающая точность), то итерации продолжаются, т. е. переходим к пункту 1, в противном случае – к пункту 8.

8. Переопределяются значения на предыдущем временном шаге, и осуществляется переход на новый (к пункту 1).

Значения теплоёмкости газа, его теплопроводности и вязкости в зависимости от температуры и давления можно найти линейной интерполяцией табличных данных из справочников [9, 10]. Текущая плотность газа будет известна через уравнение состояния газа (6).

Результаты расчетов давления, температуры и гидратонасыщенности представлены на рисунке.



Распределение по координате x давления (а), температуры (б) и гидратонасыщенности (в) в различные моменты времени

Заключение

Построена математическая модель неизотермической фильтрации газа с учетом образования/разложения гидрата, а также разработан алгоритм решения уравнений этой модели, который подробно описан на примере решения одномерной плоскопараллельной задачи закачки теплого газа в пласт, изначально содержащий газ и его гидрат. Описанный в работе метод является универсальным и может быть использован для решения других задач фильтрации газа с учетом фазовых переходов.

Литература

1. Макогон, Ю.Ф. Гидраты природных газов / Ю.Ф. Макогон – М.: Недра, 1974. – 208 с.

2. Шагапов, В.Ш. Динамика образования и разложения гидратов в системах добычи, транспортировки и хранения газа / В.Ш. Шагапов, Н.Г. Мусакаев. – М.: Наука, 2016. – 238 с.
3. Коллетт, Т.С. Растущий интерес к газовым гидратам / Т.С. Коллетт, Р. Льюис, Т. Учида // Нефтегазовое обозрение. – Осень, 2001. – С. 38–53.
4. Бородин, Л.С. Численные методы решения задачи Стефана / Л.С. Бородин // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. – 2015. – Т. 1, № 3(3). – С. 164–175.
5. Мусакаев, Н.Г. Математическое моделирование процесса добычи газа из газогидратной залежи с учетом образования льда / Н.Г. Мусакаев, М.К. Хасанов // Вестник Тюменского государственного университета. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. – 2014. – № 7. – С.43–50.
6. Латонов, В.В. Расчёт коэффициента сжимаемости природного газа / В.В. Латонов, Г.Р. Гуревич // Газовая промышленность. – 1969. – № 2. – С. 7–9.
7. Басниев, К.С. Подземная гидромеханика / К.С. Басниев, И.Н. Кочина, В.М. Максимов. – М.: Недра, 1993. – 416 с.
8. Истомин, В.А. Газовые гидраты в природных условиях / В.А. Истомин, В.С. Якушев. – М.: Недра, 1992. – 236 с.
9. Варгафтик, Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей / Н.Б. Варгафтик. – 2-е изд., перераб. и доп. – М.: Наука, 1972. – 720 с.
10. Варгафтик, Н.Б. Справочник по теплопроводности жидкостей и газов / Н.Б. Варгафтик, Л.П. Филиппов, А.А. Тарзиманов, Е.Е. Тоцкий. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 352 с.

Поступила в редакцию 27 января 2017 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2017, vol. 9, no. 2, pp. 22–29*

DOI: 10.14529/mmph170203

MATHEMATICAL MODEL AND ALGORITHM FOR SOLVING THE PROBLEM OF NON-ISOTHERMAL GAS FILTRATION IN RESERVOIR IN CASE OF HYDRATE DECOMPOSITION

N.G. Musakaev¹, S.L. Borodin¹, D.S. Belskikh²

¹ *Tyumen Branch of Khristianovich Institute of Theoretical and Applied Mechanics SB RAS, Tyumen, Russian Federation*

² *Tyumen State University, Tyumen, Russian Federation*
E-mail: bedeser@yandex.ru

The paper formulates a problem of injection into porous bed, filled up in the initial condition with hydrate and gas, warm (with the temperature higher than the initial temperature of the bed) gas. A mathematical model of non-isothermal gas filtration in case of gas hydrate dissociation is developed to solve this problem. The article presents a solution algorithm, where an implicit difference scheme, a sweep method and a method of simple integration are applied. The method for calculating hydrate saturation from several limiting conditions is suggested. It can be used for solution of other phase-change problems, also for multidimensional Stefan problems, as well as problems with an extended phase transition zone. After that the problem is considered in one-dimensional plane-parallel formulation with regard to required initial and boundary conditions for finding a computational solution of a set of equations describing this model. At the end, the paper presents the problem calculation results using the suggested method, on the basis of which the distribution of parameter values for some time intervals are shown. In the performed calculations the reservoir in the initial condition is filled up with methane and its hydrate.

Keywords: non-isothermal filtration of gas; gas hydrate; numerical method; phase transition.

References

1. Makogon Yu.F. *Gidraty prirodnykh gazov* (Natural gas hydrates). Moscow, Nedra, 1974, 208 p. (in Russ.).
2. Shagapov V.Sh., Musakaev N.G. *Dinamika obrazovaniya i razlozheniya gidratov v sistemakh dobychi, transportirovki i khraneniya gaza* (Dynamics of hydrate formation and decomposition in the systems for gas production, transportation and storing). Moscow, Nauka Publ., 2016, 238 p. (in Russ.).
3. Kollett T.S., L'yuis R., Uchida T. *Neftgazovoe obozrenie*, Autumn, 2001, pp. 38–53. (in Russ.).
4. Borodin L.S. *Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy*, 2015, Vol. 1, no. 3(3), pp. 164–175. (in Russ.).
5. Musakaev N.G., Khasanov M.K. *Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy*, 2014, no. 7, pp. 43–50. (in Russ.).
6. Latonov V.V., Gurevich G.R. *Gazovaya promyshlennost'*, 1969, no. 2, pp. 7–9. (in Russ.).
7. Basniev K.S., Kochina I.N., Maksimov V.M. *Podzemnaya gidromekhanika* (Subsurface hydro-mechanics), Moscow, Nedra Publ., 1993, 416 pp. (in Russ.).
8. Istomin V.A., Yakushev V.S. *Gazovye gidraty v prirodnykh usloviyakh* (Gas hydrates in natural environment), Moscow, Nedra Publ., 1992, 236 p. (in Russ.).
9. Vargaftik N.B. *Spravochnik po teplofizicheskim svoystvam gazov i zhidkostey* (Reference book on heat-transfer properties of gas and liquid). Moscow, Nauka Publ., 1972, 720 p. (in Russ.).
10. Vargaftik N.B., Filippov L.P., Tarzimanov A.A., Totskiy E.E. *Spravochnik po teploprovodnosti zhidkostey i gazov* (Reference book on heat conductivity of liquid and gas). Moscow, Energoatomizdat Publ., 1990, 352 p. (in Russ.).

Received January 27, 2017

ОБ ОДНОЙ СКАЛЯРНОЙ ФОРМЕ ДВУМЕРНОЙ ЗАДАЧИ ШВАРЦА И ЕЕ ПРИМЕНЕНИЯХ

В.Г. Николаев

Новгородский государственный университет имени Ярослава Мудрого, Великий Новгород, Российская Федерация

E-mail: vg14@inbox.ru

Изучена задача Шварца для 2-вектор-функций, аналитических по Дуглису с матрицей J , имеющей разные собственные числа. Проведена редукция задачи Шварца к равносильной граничной задаче для скалярного функционального уравнения. Эта редукция применена для доказательства трех теорем существования и единственности решений задачи Шварца в областях, ограниченных контуром Ляпунова.

Ключевые слова: матрица; жорданова форма; собственное число; собственный вектор; голоморфная функция; контур Ляпунова.

1. Основные определения и постановка задачи

Определение 1. [1–3] Пусть $n \times n$ -матрица J не имеет вещественных собственных чисел. Аналитической по Дуглису или J -аналитической с матрицей J называется комплексная n -вектор-функция $\phi = \phi(z) \in C^1(D)$, для которой в области $D \subset \mathbb{R}^2$ выполнено уравнение

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} - J \frac{\partial \phi}{\partial x} = 0. \quad (1)$$

Замечание 1. Из (1) вытекает, что J -аналитические функции определены с точностью до вектор-постоянной.

Определение 2. В скалярном случае при $J = \lambda$, $\text{Im } \lambda \neq 0$ функцию $f = f_\lambda(z) \in C^1(D)$, для которой в области $D \subset \mathbb{R}^2$ выполнено уравнение

$$\frac{\partial f_\lambda}{\partial y} - \lambda \frac{\partial f_\lambda}{\partial x} = 0,$$

будем называть λ -голоморфной в области D .

В [1] показано, что система уравнений в частных производных первого порядка (1) является эллиптической. Рассмотрим для нее при $n = 2$ следующую граничную задачу Шварца [1–3].

Пусть конечная односвязная область $D \subset \mathbb{R}^2$ ограничена контуром Γ . Требуется найти J -аналитическую с матрицей J в области D 2-вектор-функцию $\phi(z) \in C(\bar{D})$, которая удовлетворяет граничному условию

$$\text{Re } \phi(z)|_\Gamma = (\psi_1, \psi_2), \quad (2)$$

где вещественная 2-вектор-функция $\psi = (\psi_1, \psi_2) \in C(\Gamma)$ задана.

Как известно [1], свойства λ -голоморфных функций тождественны свойствам обычных голоморфных ($\lambda = i$) функций. В частности, однородная ($\psi \equiv 0$) задача (2) для них имеет только постоянные решения. Но при $n > 1$ это уже не так: можно построить [3] при произвольном n решения однородной задачи Шварца в виде квадратичных вектор-форм. Один из таких примеров для $n = 2$ приведен в конце статьи. Поэтому вопрос существования и единственности решений задачи (2) является нетривиальным.

В теореме 1 задача Шварца для 2×2 -матриц, имеющих разные собственные числа, преобразована к равносильному скалярному функциональному уравнению. Затем это уравнение применено к изучению неоднородной задачи Шварца – теоремы 3–5.

2. Редукция задачи Шварца к скалярному уравнению при $n = 2$

Ниже будем обозначать через f_λ и g_μ соответственно λ - и μ -голоморфные функции (см. определение 2). Символами x, y обозначаем векторы из C^2 . Соответственно, \bar{x}, \bar{y} – комплексное сопряжение векторов x, y . Обозначим через $Q = (x, y)$ жорданов базис матрицы J . Имеет место

Теорема 1. Пусть 2×2 -матрица J имеет собственный вектор y не кратный вещественному и разные собственные числа $\lambda \neq \mu$. Тогда разрешимость задачи Шварца для произвольной граничной 2-вектор-функции $\psi \in C(\Gamma)$ равносильна разрешимости скалярной задачи

$$g_\mu + \bar{f}_\lambda + l \cdot f_\lambda|_\Gamma = \varphi(t), \quad f_\lambda, g_\mu \in C(\bar{D}), \quad l = \frac{\det(x, \bar{y})}{\det(x, y)} \in \mathbb{C} \tag{3}$$

для произвольной скалярной комплексной функции $\varphi(t) \in C(\Gamma)$.

Замечание 2. Решения задачи Шварца (однородной или неоднородной) существуют одновременно для всех матриц J из условия теоремы 1 с одинаковым по модулю числом l в (3).

▷ Действительно, пусть известно, что (3) выполнено при некотором $l' \in \mathbb{C}$, и пусть $l \in \mathbb{C}$ – другое число, причем $|l|=|l'|$. Умножим обе части левого уравнения (3) на такое число $a \in \mathbb{C}$, чтобы $l = al'/a$. Тогда первое уравнение в (3) примет следующий вид:

$$a\varphi|_\Gamma = a g_\mu + a \bar{f}_\lambda + al' f_\lambda = a g_\mu + \bar{a} f_\lambda + \frac{a}{a} \cdot l' \cdot \bar{a} f_\lambda. \tag{4}$$

Переобозначим в (4):

$$g_\mu = a g_\mu, \quad f_\lambda = \bar{a} f_\lambda, \quad l = \frac{a}{a} l', \quad \varphi = a\varphi. \tag{5}$$

Из (4) и (5) вытекает, что (3) выполняется одновременно для l и l' , где $|l|=|l'|$, если граничная функция φ – произвольная. ◁

Доказательство теоремы 1. Пусть $J_1 = \text{diag}(\lambda, \mu)$ – жорданова форма матрицы J . По условию $Q = (x, y)$ – жорданов базис матрицы J . Разложим вектор \bar{y} по базису x, y :

$$\bar{y} = l_1 x + l y, \quad l_1, l \in \mathbb{C}, \quad l = \frac{\det(x, \bar{y})}{\det(x, y)}. \tag{6}$$

В (6) использованы формулы Крамера. Поскольку $Jx = \lambda x$, $Jy = \mu y$, то

$$J\bar{y} = J(l_1 x + l y) = \lambda l_1 x + \mu l y + \lambda l y - \lambda l y = \lambda(l_1 x + l y) + (\mu - \lambda)l y = \lambda\bar{y} + (\mu - \lambda)l y.$$

Таким образом, матрица $J_1 = (Q')^{-1} J Q'$ оператора J в базисе $Q' = (\bar{y}, y)$ будет иметь следующий вид:

$$J_1 = \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ (\lambda - \mu)l & \mu \end{pmatrix}. \tag{7}$$

После подстановки $J = Q' J_1 (Q')^{-1}$ в (1) и умножения обеих частей на $(Q')^{-1}$ получим с учетом (7) следующие два равенства:

$$\frac{\partial}{\partial y} \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \lambda & 0 \\ (\lambda - \mu)l & \mu \end{pmatrix} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \begin{pmatrix} f \\ g \end{pmatrix} = 0, \quad (f, g)^T = (Q')^{-1} \phi. \tag{8}$$

Из первого равенства в (8) вытекает, что

$$f = f_\lambda = u + i v, \quad g = g_\mu + l \cdot f_\lambda = p + i q, \tag{9}$$

где функции u, v, p, q – вещественные.

Допустим, что $\phi = \phi(z) \in C(\bar{D})$ во втором уравнении в (8) – решение задачи Шварца с некоторой граничной функцией $\psi \in C(\Gamma)$. Тогда функции f, g в (9) известны *a priori*. Обозначим вектор $y = (a_1, a_2)$, где $a_1, a_2 \in \mathbb{C}$. Тогда решение $\phi(z)$ с учетом (8) можно записать в виде

$$\phi(z) = Q' \cdot (f, g)^T = (\bar{y}, y) \cdot (f, g)^T = \begin{pmatrix} \bar{a}_1 & a_1 \\ \bar{a}_2 & a_2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} u + i v \\ p + i q \end{pmatrix}. \tag{10}$$

Теперь граничное условие (2) принимает следующий вид:

$$\begin{cases} \text{Re} [\bar{a}_1(u + i v) + a_1(p + i q)]|_\Gamma = \psi_1, \\ \text{Re} [\bar{a}_2(u + i v) + a_2(p + i q)]|_\Gamma = \psi_2. \end{cases} \tag{11}$$

Заметим, что для $k = 1, 2$ справедливо тождество

$$\operatorname{Re}[\bar{a}_k(u+iv) + a_k(p+iq)]|_{u=-p, v=q} = \operatorname{Re}[\bar{a}_k(-p+iq) - \overline{\bar{a}_k(-p+iq)}] = 0. \quad (12)$$

Поэтому единственное решение (11) как алгебраической системы относительно u, v можно найти в виде:

$$u = -p + r(\psi_1, \psi_2), \quad v = q + h(\psi_1, \psi_2), \quad (13)$$

где $r(\cdot), h(\cdot)$ – линейные функции своих переменных.

▷ Действительно, обозначим $a_1 = a + bi, a_2 = c + di, a, b, c, d \in \mathbb{R}$. Тогда после подстановки (13) в (11) имеем в силу (12):

$$\begin{cases} \operatorname{Re}[\bar{a}_1(r+ih)] = \operatorname{Re}[(a-bi)(r+ih)]|_{\Gamma} = ar + bh = \psi_1, \\ \operatorname{Re}[\bar{a}_2(r+ih)] = \operatorname{Re}[(c-di)(r+ih)]|_{\Gamma} = cr + dh = \psi_2. \end{cases}$$

Так как по условию собственный вектор $y = (a_1, a_2) = (a + bi, c + di)$ матрицы J не кратен вещественному, то определитель

$$\begin{vmatrix} a & b \\ c & d \end{vmatrix} \neq 0.$$

Поэтому алгебраическая система

$$\begin{cases} a \cdot r + b \cdot h = \psi_1, \\ c \cdot r + d \cdot h = \psi_2, \end{cases} \quad a, b, c, d \in \mathbb{R} \quad (14)$$

имеет единственное решение относительно переменных r, h , откуда и вытекает (13). ◁

Далее заметим, что пара равенств вещественных функций (13) равносильна одному комплексному функциональному уравнению

$$u - iv + (p+iq)|_{\Gamma} = r - ih, \quad (15)$$

которое имеет место на контуре Γ . С учетом (9) равенство (15) можно записать в виде:

$$\bar{f}_{\lambda} + g_{\mu} + l \cdot f_{\lambda}|_{\Gamma} = r(\psi_1, \psi_2) - ih(\psi_1, \psi_2) = \varphi(t), \quad f_{\lambda}, g_{\mu} \in C(\bar{D}), \quad (16)$$

что совпадает с первым уравнением в (3).

Число l в (16) задано формулой (6), совпадающей с (3). Таким образом, существование решения $\phi(z)$ задачи Шварца означает разрешимость (16) для некоторой граничной функции φ . Но если граничная вектор-функция $\psi = (\psi_1, \psi_2)$ в (2) при этом произвольна, то и $\varphi = (r, -h)$ в (16), т. е. и в (3), будет произвольной. Действительно, взаимосвязь между парами вещественных функций r, h и ψ_1, ψ_2 определяется неособой системой (14). Напомним, что коэффициенты (14) определяются по вектору $y = (a + bi, c + di)$ – собственному вектору матрицы J .

В обратную сторону: пусть задача (16), т. е. и (3), разрешима для любой граничной функции φ . Найдем по заданной функции $\psi = (\psi_1, \psi_2)$ с помощью (14) функцию $\varphi = r - ih$. Пусть f_{λ}, g_{μ} – решение (16) с этой функцией φ . Тогда в силу (8) и (9) решение задачи Шварца дается формулой

$$\phi(z) = Q' \cdot (f, g)^T = (\bar{y}, y) \cdot (f_{\lambda}, g_{\mu} + l \cdot f_{\lambda})^T. \quad (17)$$

Теорема 1 доказана.

3. Применение теоремы 1 к доказательству существования решений задачи Шварца при $n = 2$

Применим уравнение (3) к неоднородной задаче Шварца. Вместо произвольного контура $\Gamma = \partial D$ будем рассматривать кривую Ляпунова. Все решения будем искать в классе функций, непрерывных по Гельдеру. В связи с этим напомним известное

Определение 3. Гладкая кривая $\Gamma \subset \mathbb{R}^2$ называется кривой (контуром) Ляпунова, если существуют такие два вещественных числа $a > 0$ и $b, 0 < b \leq 1$, что для любых двух точек $z_1, z_2 \in \Gamma$ выполняется условие Ляпунова

$$|\theta| < a \cdot |z_1 - z_2|^b,$$

где θ – угол между касательными или нормальными к Γ точкам z_1, z_2 .

Ниже будет использован следующий результат, полученный А.П. Содатовым в [2].

Теорема 2. Пусть кривая $\Gamma = \partial D$ – кривая Ляпунова, пусть $(\operatorname{Im} \lambda) \cdot (\operatorname{Im} \mu) < 0$. Тогда для любой граничной функции φ из класса Гельдера $H^\sigma(\Gamma)$, $0 < \sigma < 1$ решение задачи

$$f_\lambda(z) + g_\mu(z)|_\Gamma = \varphi(z), \quad f_\lambda, g_\mu \in H^\sigma(\bar{D})$$

существует и единственно (с точностью до постоянной).

Из теорем 1, 2 вытекают три приведенные ниже теоремы.

Теорема 3. Пусть в условиях теоремы 1 $\Gamma = \partial D$ – контур Ляпунова. При этом собственные векторы матрицы J комплексно сопряжены: $x = \bar{y}$. Тогда для любой граничной функции $\psi \in H^\sigma(\Gamma)$, $0 < \sigma < 1$ решение задачи Шварца в классе $\phi \in H^\sigma(\bar{D})$ существует и единственно с точностью до вектор-постоянной.

Доказательство. Положим в (3) $x = \bar{y}$, тогда $l = 0$. В результате для (3) оказывается выполненным утверждение теоремы 2. Поэтому из теоремы 1 вытекает утверждение настоящей теоремы.

Теорема 4. Пусть в условиях теоремы 1 $\Gamma = \partial D$ – контур Ляпунова. При этом матрица J имеет вещественный собственный вектор x . Тогда выполнено утверждение теоремы 3.

Если при этом граничная функция $\psi \in C^2(\Gamma)$, то решение $\phi = \phi(z)$ задачи Шварца обладает свойством

$$\frac{\partial \phi}{\partial x}, \frac{\partial \phi}{\partial y} \in H^\sigma(\bar{D}). \quad (18)$$

Доказательство. Если в (3) вектор x вещественный, то $|l| = 1$.

Покажем, что при каждом таком $l \in \mathbb{C}$ решение задачи (3) всегда существует и единственно, если Γ – контур Ляпунова и $\varphi \in H^\sigma(\Gamma)$.

▷ В силу замечания 2 достаточно рассмотреть случай $l = 1$. Обозначим: $\varphi = \varphi_1 + i\varphi_2$, $f_\lambda = u + iv$, $g_\mu = p + iq$. Тогда (3) запишется в виде

$$p + iq + u - iv + u + iv = p + iq + 2u|_\Gamma = \varphi_1 + \varphi_2 i. \quad (19)$$

Из (19) имеем: $q|_\Gamma = \varphi_2$. Согласно известной теореме [4], μ -голоморфная функция $g_\mu(z) \in H^\sigma(\bar{D})$ может быть единственным образом (с точностью до постоянной) восстановлена по граничному значению своей мнимой части $\varphi_2 \in H^\sigma(\Gamma)$. Тот же результат будет и для реальной части.

Тогда из (19) станет известно граничное значение реальной части функции f_λ , т. е. $u|_\Gamma = 1/2(\varphi_1 - p) \in H^\sigma(\Gamma)$. Отсюда в силу той теоремы из [4] можно однозначно восстановить функцию $f_\lambda \in H^\sigma(\bar{D})$. <

Таким образом, в силу теоремы 1 для произвольного l , $|l| = 1$ справедливо и утверждение теоремы 3.

Пусть теперь $\psi \in C^2(\Gamma)$. Это означает с учетом (14), что первые производные функций $\psi = (\psi_1, \psi_2)$ и $\varphi = (r, -h)$ непрерывны по Гельдеру на Γ . Отсюда согласно [4] восстановленные из (19) функции f_λ, g_μ будут обладать свойством

$$\frac{\partial f_\lambda}{\partial x}, \frac{\partial f_\lambda}{\partial y}, \frac{\partial g_\mu}{\partial x}, \frac{\partial g_\mu}{\partial y} \in H^\sigma(\bar{D}). \quad (20)$$

Из (20) в силу (17) вытекает (18). Теорема 4 доказана.

Теорема 5. Пусть в условиях теоремы 1 $\Gamma = \partial D$ – контур Ляпунова. При этом матрица J имеет комплексно сопряженные собственные числа $\mu = \bar{\lambda}$. Тогда при $l \neq 0$ в (3) выполнено утверждение теоремы 3

Доказательство. В данном случае задача (3) примет вид:

$$g_{\bar{\lambda}} + \bar{f}_{\lambda} + l \cdot f_{\lambda}|_{\Gamma} = \varphi, \quad g_{\bar{\lambda}}, f_{\lambda} \in H^{\sigma}(\bar{D}), \quad l \neq 0. \quad (21)$$

Функция $g_{\bar{\lambda}} + \bar{f}_{\lambda}$ будет $\bar{\lambda}$ -голоморфной. Поскольку $(\text{Im } \lambda) \cdot (\text{Im } \bar{\lambda}) < 0$, то для задачи (21) при $l \neq 0$ выполнена теорема 2. Отсюда в силу теоремы 1 справедливо утверждение теоремы 3. Теорема 5 доказана.

Замечание 3. Условие $l \neq 0$ в (21) соответствует матрице J , не имеющей комплексно сопряженных собственных векторов. Из (21) следует, что при $l = 0$ решение задачи Шварца для матриц из условия теоремы 5 не единственно и не всегда существует.

Теоремы 3 и 4 означают в частности, что при $\lambda \neq \mu$ и при $l = \{0; 1\}$ однородное ($\varphi \equiv 0$) уравнение (3) имеет только тривиальные решения. Покажем, что такое его свойство справедливо не для всех l .

Пример 1. Пусть

$$J = \begin{pmatrix} 4i & 12 \\ \frac{1}{2} & -i \end{pmatrix}, \quad \phi(z) = \begin{pmatrix} -2x^2 - 16y^2 + 1 + 8xyi \\ (x^2 + 2y^2) \cdot i \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Матрица J имеет разные собственные числа $\lambda = i$ и $\mu = 2i$. Функция $\phi(z)$ будет согласно определению 1 J -аналитической с матрицей J . При этом $\text{Re } \phi(z)|_{\Gamma} = 0$ на эллипсе $\Gamma: 2x^2 + 16y^2 = 1$.

Таким образом, (22) доставляет пример нетривиального решения однородной задачи Шварца (2), которому в силу (14) соответствует $\varphi \equiv 0$ в (3).

Прямые вычисления показывают, что для матрицы J (22) собственные векторы x, y и число l (3) имеют, соответственно, вид:

$$x = (2i, \frac{1}{2}), \quad y = (3i, \frac{1}{2}), \quad l = \frac{\det(x, \bar{y})}{\det(x, y)} = 5.$$

Следовательно, в силу теоремы 1 и замечания 2 при $|l| = 5$ однородное уравнение (3) имеет решение в виде квадратичных функций $f_{\lambda}(z)$ и $g_{\mu}(z)$.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания (проект 1.6644.2017/БЧ).

Литература

1. Солдатов, А.П. Функции, аналитические по Дуглису / А.П. Солдатов. – Изд-во НовГУ, 1995. – 196 с.
2. Николаев, В.Г. О решении задачи Шварца для J -аналитических функций в областях, ограниченных контуром Ляпунова / В.Г. Николаев, А.П. Солдатов / Дифференциальные уравнения. – 2015. – Т. 51, № 7. – С. 965–969. DOI: 10.1134/S0374064115070158
3. Николаев, В.Г. О некоторых свойствах J -аналитических функций / В.Г. Николаев // Вестник СамГУ, естественнонаучная серия. – 2013. – Т. 3(104). – С. 25–32.
4. Мусхелишвили, Н.И. Сингулярные интегральные уравнения / Н.И. Мусхелишвили. – М.: Наука, 1968. – 342 с.

Поступила в редакцию 13 октября 2016 г.

**ONE FORM OF THE SCALAR TWO-DIMENSIONAL SCHWARZ PROBLEM
AND ITS APPLICATIONS**

V.G. Nikolaev

*Federal State-Funded Educational Institution of Higher Vocational Education "Yaroslav-the-Wise Novgorod State University", Velikiy Novgorod, Russian Federation**E-mail: vg14@inbox.ru*

The paper deals with the problem of existence and uniqueness of the Schwarz problem solution for 2-vector-functions, being analytic on Douglis, in regions bounded by the Lyapunov contour, and in classes of functions that are Holder continuous. However, the matrix J should have different eigenvalues λ , μ , and at least one eigenvector that is not multiple of the real one.

At the beginning of the paper, the inhomogeneous Schwarz problem with a boundary function ψ is transformed. As a result of the performed reduction the Schwarz problem turns into an equivalent boundary problem for an inhomogeneous scalar functional equation. It connects boundary values of λ - and μ -holomorphic functions f , g , defined in the plane region D , with a certain boundary function φ , which is constructed by ψ .

This functional equation for different matrices J is distinguished only by a complex coefficient l , which is calculated using the matrix J . In this case the following circular property is found: the Schwarz problem is solvable or not simultaneously for all matrices, which coefficient module is equal. That's why without loss of generality l can be considered a real number. It's proved that the studied functional equation for cases $l = 0$ and $|l| = 1$ has a unique solution for any right side of φ . The matrices J having complex conjugate eigenvectors and one real eigenvector correspond to these two cases. Therefore, for these matrices the inhomogeneous Schwarz problem in case of any boundary function ψ has the unique solution. We consider absolutely and irrespectively the case when the matrix J has complex conjugate eigenvalues.

At the end of the paper it's shown that in case of $|l| = 5$ the homogeneous ($\varphi = 0$) functional equation has a nontrivial solution.

Keywords: matrix; Jordan canonical form; eigenvalue; eigenvector; holomorphic function; Lyapunov contour.

References

1. Soldatov A.P. *Funktsii, analiticheskie po Duglisu* (Functions being analytic on Douglis). NovGU Publ., 1995, 196 p. (in Russ.).
2. Nikolaev V.G., Soldatov A.P. On the solution of the Schwarz problem for J -analytic functions in a domain bounded by a Lyapunov contour. *Differential Equations*, 2015, Vol. 51, no. 7, pp. 962–966. DOI: 10.1134/S0012266115070150
3. Nikolaev V.G. On some properties of J -analytical functions. *Vestnik SamGU. Estestvenno-Nauchnaya Ser.*, 2013, no. 3(104), pp. 25–32. (in Russ.).
4. Muskhelishvili N.I. *Singulyarnye integral'nye uravneniya* (Singular integral equation). Moscow, Nauka Publ., 1968, 342 p. (in Russ.).

Received October 13, 2016

ОБ ОДНОЙ ЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧЕ УПРАВЛЕНИЯ ПРИ НАЛИЧИИ ПОМЕХИ

В.И. Ухоботов

Челябинский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: ukh@csu.ru

Рассматривается линейная задача управления при наличии воздействия со стороны неконтролируемой помехи. Её значения принадлежат компакту. Управление ищется в виде произведения скалярной функции на векторную функцию. Терминальная часть платы зависит от модуля линейной функции вектора состояния. Интегральная составляющая платы является интегралом на отрезке от степени скалярной функции. Найдены необходимые и достаточные условия, при выполнении которых допустимое управление является оптимальным.

Ключевые слова: управление; помеха; дифференциальная игра.

Введение

Линейную задачу управления при наличии воздействия со стороны неконтролируемой помехи и с фиксированным моментом окончания с помощью линейной замены переменных [1] можно свести к виду, когда в правой части новых уравнений стоит только сумма управления и помехи, значения которых принадлежат заданным множествам, зависящим от времени. В случае, если в линейной задаче управления с помехой платой является значение в заданный момент времени модуля линейной функции, то линейная замена переменных приводит к однотипной задаче, когда множества значений управления и помехи являются отрезками, зависящими от времени. В более общем случае такие задачи характеризуются тем, что вектограммами управления и помехи являются шары, радиусы которых зависят от времени. Такую динамику имеют после замены и известные дифференциальные игры «изотропные ракеты» [2], контрольный пример Л.С. Понтрягина [3]. Для таких дифференциальных игр в случае, когда терминальное множество является шаром заданного радиуса, в [3] построен альтернированный интеграл. В [4] построены оптимальные позиционные стратегии игроков. В работе [5] построен альтернированный интеграл для однотипных игр с произвольным выпуклым замкнутым терминальным множеством и построены оптимальные позиционные управления игроков. В работе [6] первый игрок, выводя фазовую точку на круг заданного радиуса, минимизирует интегральную плату, которая задается выпуклой функцией от нормы его управления.

В настоящей работе рассматривается однотипная задача управления с помехой, в которой управление строится из условия минимизации платы, являющейся суммой как терминальной, так и интегральной составляющих. Доказана теорема существования оптимального управления с достаточно широкими ограничениями на рассматриваемый класс задач. Найдены необходимые и достаточные условия, при выполнении которых допустимое управление является оптимальным.

Постановка задачи

Рассматривается управляемый процесс

$$\dot{x} = A(t)x + \varphi B(t)\xi + \eta, \quad x(t_0) = x_0; \quad x \in R^m, \quad t \leq p. \quad (1)$$

Здесь p – заданный момент окончания процесса управления, а t_0 – начальный момент времени; $\varphi \in R$ и $\xi \in M$ являются управлениями, причем множество M является связным симметричным относительно начала координат компактом в R^s ; помеха η принадлежит связному компактному $Q \subset R^m$; $A(t)$ и $B(t)$ – непрерывные при $t_0 \leq t \leq p$ матрицы соответствующих размерностей.

Определим допустимое управление. Для любого числа $\rho \geq 1$ обозначим через $L_\rho[t_0, p]$ пространство измеримых функций $\phi: [t_0, p] \rightarrow R$ с суммируемой на отрезке $[t_0, p]$ степенью $|\phi(r)|^\rho$.

Задано число $q > 1$. Допустимым управлением являются неотрицательная функция $\varphi(\cdot) \in L_q[t_0, p]$ и произвольная функция $\xi: [t_0, p] \times R^m \rightarrow M$. Помеха реализуется в виде произвольной функции $\eta: [t_0, p] \times R^m \rightarrow Q$.

Такое определение допустимого управления продиктовано следующим соображением. В задачах управления механическими системами переменного состава, движение в которых описывается уравнением Мещерского [7], возможен случай, когда закон изменения реактивной массы нужно задавать программным образом, а управлять можно только направлением относительной скорости ее отделения. В этом случае приходим к сформулированному выше допустимому управлению.

Следуя [1], движения системы (1), порожденные допустимыми управлением и помехой, определим с помощью ломаных.

Возьмем разбиение ω отрезка $[t_0, p]$ с диаметром $d(\omega)$

$$\omega: t_0 < t_1 < \dots < t_j < t_{j+1} = p, \quad d(\omega) = \max(t_i - t_{i+1}), i = \overline{0, j}.$$

Положим $x_\omega(t_0) = x_0$ и при $t_i \leq t \leq t_{i+1}, i = \overline{0, j}$

$$\dot{x}_\omega(t) = A(t)x_\omega(t) + \varphi(t)B(t)\xi(t_i, x_\omega(t_i)) + \eta(t_i, x_\omega(t_i)). \quad (2)$$

Можно показать, что семейство ломаных (2), определенных на отрезке $[t_0, p]$, является равномерно ограниченным и равномерно непрерывным [4, с. 56]. По теореме Арцела [8, с. 104], из любой последовательности ломаных (2) можно выделить подпоследовательность, равномерно сходящуюся на отрезке $[t_0, p]$. Под движением, реализовавшимся при допустимых $\varphi(t), \xi(t, x), \eta(t, x)$ из начального состояния $x(t_0) = x_0$, будем понимать любой равномерный предел последовательности ломаных (2), у которых диаметр разбиения $d(\omega)$ стремится к нулю.

Показателем качества управления является величина

$$G(\langle \psi_0, x(p) \rangle - C) + \int_{t_0}^p \varphi^q(r) dr. \quad (3)$$

Здесь $\psi_0 \in R^m$ – заданный вектор; $\langle \cdot, \cdot \rangle$ – скалярное произведение в R^m ; C – заданное число; $G: R_+ \rightarrow R$ – заданная функция.

Управление строится исходя из принципа минимизации гарантированного результата [1] показателя качества (3).

Переход к одномерной одготипной задаче

Следуя [1, с. 160], перейдем к новой управляемой системе, в уравнениях движения которой отсутствует фазовый вектор. Рассмотрим при $t_0 \leq t \leq p$ решение $\psi(t)$ задачи Коши:

$$\dot{\psi} = -A^*(t)\psi, \quad \psi(t_0) = \psi_0. \quad (4)$$

Здесь $A^*(t)$ – транспонированная матрица. Положим

$$b_-(t) = \min_{\eta \in Q} \langle \psi(t), \eta \rangle, \quad b_+(t) = \max_{\eta \in Q} \langle \psi(t), \eta \rangle. \quad (5)$$

Тогда из связности компакта Q следует [9, с. 333, теорема 4], что

$$\langle \psi(t), \eta \rangle = \frac{1}{2}(b_+(t) + b_-(t)) + b(t)v, \quad |v| \leq 1, \quad b(t) = \frac{1}{2}(b_+(t) - b_-(t)) \geq 0. \quad (6)$$

Обозначим

$$a(t) = \max_{\xi \in M} \langle \psi(t), B(t)\xi \rangle. \quad (7)$$

Из связности и из симметрии компакта M следует, что $a(t) \geq 0$ и

$$\langle \psi(t), B(t)\xi \rangle = -a(t)u, \quad |u| \leq 1. \quad (8)$$

Отметим, что функции (5) и (7) являются непрерывными [10, лемма II.3.5]. Следовательно, непрерывной является и функция $b(t)$ (6).

Перейдем к новой переменной

$$z = \langle \psi(t), x \rangle + \frac{1}{2} \int_t^p (b_+(r) + b_-(r)) dr - C. \quad (9)$$

Тогда из (4) и (9) следует, что $z(p) = \langle \psi_0, x(p) \rangle - C$, а ломаная $z_\omega(t)$, отвечающая ломаной (2), определяется равенствами

$$\dot{z}_\omega(t) = -\varphi(t)a(t)u_i + b(t)v_i, \quad |u_i| \leq 1, \quad |v_i| \leq 1.$$

Таким образом, получили одномерную однотипную задачу управления

$$\dot{z} = -\varphi(t)a(t)u + b(t)v, \quad z(t_0) = z_0; \quad \varphi(t) \geq 0, \quad |u| \leq 1, \quad |v| \leq 1. \quad (10)$$

с критерием качества

$$G(|z(p)|) + \int_{t_0}^p \varphi^q(r) dr \rightarrow \min_u \max_v. \quad (11)$$

В этой задаче допустимым управлением являются неотрицательная функция $\varphi(\cdot) \in L_q[t_0, p]$ и произвольная функция $u(t, z)$ с $|u(t, z)| \leq 1$. Допустимой помехой является произвольная функция $v(t, z)$ с $|v(t, z)| \leq 1$. Движение $z(t)$ определяется как равномерный предел последовательности ломаных

$$z_\omega(t) = z_\omega(t_i) - \int_{t_i}^t \varphi(r)a(r)dr u(t_i, z_\omega(t_i)) + \int_{t_i}^t b(r)dr v(t_i, z_\omega(t_i)), \quad t_i \leq t \leq t_{i+1}$$

с диаметром разбиения $d(\omega) \rightarrow 0$.

Определение 1. Решением задачи (10), (11) называется допустимое управление $\varphi_0(t), u_0(t, z)$ и число V_0 такие, что

1) для любой допустимой помехи $v(t, z)$ и для любого движения $z(t)$ с начальным условием $z(t_0) = z_0$, порожденного $\varphi_0(t), u_0(t, z)$ и $v(t, z)$, выполнено неравенство:

$$G(|z(p)|) + \int_{t_0}^p \varphi_0^q(r) dr \leq V_0;$$

2) для любого допустимого управления $\varphi(t), u(t, z)$ и для любого числа $V < V_0$ найдется допустимая помеха $v(t, z)$ такая, что для любого движения $z(t)$ с начальным условием $z(t_0) = z_0$, порожденного $\varphi(t), u(t, z)$ и $v(t, z)$, выполнено неравенство

$$G(|z(p)|) + \int_{t_0}^p \varphi^q(r) dr > V.$$

Условия оптимальности в однотипной задаче

Рассмотрим задачу (10), (11) в общем случае, когда z, u, v принадлежат пространству R^n , а $|\cdot|$ – норма в R^n .

Зафиксируем неотрицательную функцию $\varphi(\cdot) \in L_q[t_0, p]$, число $\varepsilon \geq 0$ и рассмотрим дифференциальную игру

$$\dot{z} = -\varphi(t)a(t)u + b(t)v, \quad |u| \leq 1, \quad |v| \leq 1 \quad (12)$$

с условием окончания

$$|z(p)| \leq \varepsilon. \quad (13)$$

Для полноты изложения считаем, что функции $a(t) \geq 0$ и $b(t) \geq 0$ суммируемы на отрезке $[t_0, p]$, причем $a(\cdot) \in L_l[t_0, p]$. Здесь $l = \frac{q}{q-1}$.

Для такой однотипной игры Л.С. Понтрягин [3] построил альтернированный интеграл. Из его вида следует, что начальное положение $z(t_0)$ принадлежит значению альтернированного интеграла в момент времени t_0 тогда и только тогда, когда:

$$f_1(\varphi(\cdot)) = |z(t_0)| + \int_{t_0}^p (b(r) - \varphi(r)a(r)) dr \leq \varepsilon, \quad (14)$$

$$f_2(\varphi(\cdot)) = \max_{t_0 \leq t \leq p} \int_t^p (b(r) - \varphi(r)a(r)) dr \leq \varepsilon. \quad (15)$$

Обозначим

$$f(\varphi(\cdot)) = \max(f_1(\varphi(\cdot)); f_2(\varphi(\cdot))), \quad (16)$$

$$w(z) = \frac{z}{|z|} \text{ при } |z| > 0 \text{ и } w(0) - \text{любое с ограничением } |w(0)| = 1. \quad (17)$$

Теорема 1 [4, теоремы 8.1 и 8.2]. Для начального состояния $t_0 < p, z(t_0) \in R^n$ в игре (12), (13) управление $u = w(z)$ обеспечивает выполнение неравенства $|z(p)| \leq f(\varphi(\cdot))$ для любой функции $|v(t, z)| \leq 1$ и для любого реализовавшегося движения $z(t)$. Управление $v = w(z)$ обеспечивает выполнение неравенства $|z(p)| \geq f(\varphi(\cdot))$ для любой функции $|u(t, z)| \leq 1$ и для любого реализовавшегося движения $z(t)$.

Из этой теоремы, используя формулу (16), получим, что, если выполнены неравенства (14) и (15), то управление $u = w(z)$ обеспечивает выполнение неравенства (13) для любой функции $|v(t, z)| \leq 1$ и для любого реализовавшегося движения $z(t)$. Если же одно из неравенств (14) и (15) не выполнено, то управление $v = w(z)$ обеспечивает выполнение противоположного неравенства $|z(p)| > \varepsilon$ для любой функции $|u(t, z)| \leq 1$ и для любого реализовавшегося движения $z(t)$.

Далее будем считать, что выполнено следующее предположение.

Предположение 1. Функция $G: [t_0, +\infty) \rightarrow R$ является непрерывной, строго возрастает и $G(\varepsilon) \rightarrow +\infty$ при $\varepsilon \rightarrow +\infty$.

Рассмотрим задачу

$$f_0(\varepsilon, \varphi(\cdot)) = G(\varepsilon) + \int_{t_0}^p \varphi^q(r) dr \rightarrow \min, \quad (18)$$

$$f_1(\varphi(\cdot)) \leq \varepsilon, \quad f_2(\varphi(\cdot)) \leq \varepsilon, \quad \varepsilon \geq 0, \quad \varphi(\cdot) \in L_q[t_0, p], \quad \varphi(t) \geq 0. \quad (19)$$

Теорема 2. Пусть $\varepsilon_0 \geq 0$ и $\varphi_0(t)$ – решение задачи (18), (19). Тогда решением задачи (10), (11) являются функции $\varphi_0(t), u = w(z)$ и число $V_0 = f_0(\varepsilon_0, \varphi_0(\cdot))$.

Доказательство. При ε_0 и $\varphi_0(t)$ выполнены неравенства (14) и (15). Поэтому управление $\varphi_0(t)$ и $u = w(z)$ обеспечивает выполнение неравенства $|z(p)| \leq \varepsilon_0$ для любой функции $|v(t, z)| \leq 1$ и для любого реализовавшегося движения $z(t)$. Из условия возрастания функции G получим, что

$$G(|z(p)|) + \int_{t_0}^p \varphi_0^q(r) dr \leq f_0(\varepsilon_0, \varphi_0(\cdot)) = V_0.$$

Допустим, что существуют число $V < V_0$ и допустимое управление $\varphi(t)$ и $u = w(z)$, которое обеспечивает выполнение неравенства

$$G(|z(p)|) + \int_{t_0}^p \varphi^q(r) dr < V$$

для любой функции $|v(t, z)| \leq 1$ и для любого реализовавшегося движения $z(t)$. Тогда это допустимое управление обеспечивает неравенство

$$|z(p)| \leq G^{-1} \left(V - \int_{t_0}^p \varphi^q(r) dr \right) = \varepsilon \quad (20)$$

для любой функции $|v(t, z)| \leq 1$ и для любого реализовавшегося движения $z(t)$. Значит эти $\varepsilon \geq 0$ и $\varphi(t)$ удовлетворяют неравенствам (14) и (15) и, следовательно, ограничениям в задаче (18), (19).

Поэтому

$$V_0 \leq G(\varepsilon) + \int_{t_0}^p \varphi^q(r) dr .$$

Отсюда и из правой части (20) получим противоречие $V_0 \leq V$.

Замечание. Поскольку функция (17) удовлетворяет условию $|w(z)| = 1$, то теорема 2 остается справедливой и для случая, когда ограничение на управление u в задаче (18), имеет вид равенства $|u| = 1$.

Теорема 3. Решение в задаче (18), (19) существует.

Доказательство. Отметим вначале, что функция G ограничена снизу, а связи (19) являются совместными. Из ограниченности снизу функции G и из условия $\varphi(t) \geq 0$ следует, что значения функционала $f_0(\varepsilon, \varphi(\cdot))$ ограничены снизу. Обозначим через V_0 значение его нижней грани при ограничениях (19). Тогда существуют последовательности $\varepsilon_i \geq 0, \varphi_i : [t_0, p] \rightarrow R$, удовлетворяющие ограничениям (19), такие, что

$$\lim_{i \rightarrow +\infty} f_0(\varepsilon_i, \varphi_i(\cdot)) = V_0 . \quad (21)$$

Из (18) следует, что $G(\varepsilon_i) \leq f_0(\varepsilon_i, \varphi_i(\cdot))$. Отсюда, используя условие $G(\varepsilon) \rightarrow +\infty$ при $\varepsilon \rightarrow +\infty$, получим, что последовательность чисел ε_i ограничена. Переходя, если нужно к сходящейся подпоследовательности, считаем, что $\varepsilon_i \rightarrow \varepsilon_0$. Отсюда и из непрерывности функции $G(\varepsilon)$ следует, что $G(\varepsilon_i) \rightarrow G(\varepsilon_0)$. Из формулы (18), из сходимости последовательностей $f_0(\varepsilon_i, \varphi_i(\cdot))$ и

$G(\varepsilon_i)$ получим, что существует число $D > 0$ такое, что $\int_{t_0}^p \varphi_i^q(r) dr \leq D$ для всех $i \geq 1$. Считаем, что

существует $\lim_{i \rightarrow \infty} \int_{t_0}^p \varphi_i^q(r) dr$ (иначе перейдем к подпоследовательности).

В пространстве $L_q[t_0, p]$ любой шар слабо компактен [11, с. 256]. Поэтому, переходя, если нужно, к подпоследовательности, считаем, что существует функция $\varphi_0(\cdot) \in L_q[t_0, p]$ такая, что

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \int_{t_0}^p \varphi_i(r) \chi(r) dr = \int_{t_0}^p \varphi_0(r) \chi(r) dr \quad \text{для любой функции } \chi(\cdot) \in L_t[t_0, p] \quad (22)$$

и [11, с. 217]

$$\int_{t_0}^p \varphi_0^q(r) dr \leq \lim_{i \rightarrow \infty} \int_{t_0}^p \varphi_i^q(r) dr .$$

Из последнего неравенства, используя формулы (18) и (21), получим, что $f_0(\varepsilon_0, \varphi_0(\cdot)) \leq V_0$. Поэтому, если покажем, что ε_0 и $\varphi_0(t)$ удовлетворяют связям (19), то они будут являться решением задачи (18), (19).

Поскольку $\varphi_i(r) \geq 0$ при $r \in [t_0, p]$, то из условия (22) следует [4, с. 61], что $\varphi_0(r) \geq 0$ для почти всех $r \in [t_0, p]$. Используя неравенство Гельдера [11, с. 494–496], можно получить [4, с. 57–58], что

$$\int_t^p (b(r) - \varphi_i(r)a(r)) dr \rightarrow \int_t^p (b(r) - \varphi_0(r)a(r)) dr$$

равномерно при $t \in [t_0, p]$. Отсюда следует [4, с. 58], что

$$\max_{t_0 \leq t \leq p} \int_t^p (b(r) - \varphi_i(r)a(r)) dr \rightarrow \max_{t_0 \leq t \leq p} \int_t^p (b(r) - \varphi_0(r)a(r)) dr.$$

Таким образом, учитывая формулы (14) и (15), можем утверждать, что ε_0 и $\varphi_0(t)$ удовлетворяют связям (19).

Замечание. Если известно решение $\varphi_0(t)$ в задаче (18), (19), то, подставляя его в формулу (8) при $u = w(z)$, где z и $w(z)$ определяются формулами (9) и (17), найдем решение $\xi(t, x)$ в исходной задаче (1).

Приведем достаточные условия, при выполнении которых число ε_0 и функция $\varphi_0(t)$ являются решением задачи (18), (19).

Теорема 4. Пусть число ε_0 и функция $\varphi_0 : [t_0, p] \rightarrow R$ удовлетворяют условиям (19). Пусть существуют число $\lambda \geq 0$ и неубывающая на отрезке $[t_0, p]$ функция $\theta(t)$, такие, что $\theta(t_0) = 0$ и:

$$\int_{t_0}^p \theta(r)(b(r) - \varphi_0(r)a(r)) dr = \theta(p)\varepsilon_0, \quad (23)$$

$$\lambda \left(\int_{t_0}^p \theta(r)(b(r) - \varphi_0(r)a(r)) dr + |z(t_0)| - \varepsilon_0 \right) = 0, \quad (24)$$

$$G(\varepsilon_0) - (\lambda + \theta(p))\varepsilon_0 \leq G(\varepsilon) - (\lambda + \theta(p))\varepsilon \text{ при любом } \varepsilon \geq 0, \quad (25)$$

$$\varphi_0(t) = \left(\frac{a(t)}{q} (\lambda + \theta(t)) \right)^{\frac{1}{q-1}} \text{ при } t \in [t_0, p]. \quad (26)$$

Тогда число ε_0 и функция $\varphi_0(t)$ являются решением задачи (18), (19).

Доказательство. Возьмем произвольные число $\varepsilon \geq 0$ и функцию $\varphi(\cdot) \in L_q[t_0, p], \varphi(t) \geq 0$. Запишем функцию Лагранжа

$$\begin{aligned} \Lambda(\varepsilon, \varphi(\cdot)) &= G(\varepsilon) + \int_{t_0}^p \varphi^q(r) dr + \int_{t_0}^p \theta(r)(b(r) - \varphi(r)a(r)) dr - \theta(p)\varepsilon + \lambda \left(\int_{t_0}^p (b(r) - \varphi(r)a(r)) dr + |z(p)| - \varepsilon \right) = \\ &= G(\varepsilon) - (\lambda + \theta(p))\varepsilon + \int_{t_0}^p \left(\varphi^q(r) - (\lambda + \theta(r) + \lambda)\varphi(r)a(r) + (\lambda + \theta(r))b(r) \right) dr + \lambda |z(p)|. \end{aligned}$$

Минимальное значение функции Лагранжа по $\varphi(\cdot) \in L_q[t_0, p], \varphi(t) \geq 0$ находится из условия минимума подинтегрального выражения

$$\beta(\varphi) = \varphi^q - (\theta(r) + \lambda)\varphi \rightarrow \min, \varphi \geq 0.$$

Функция $\beta(\varphi)$ является выпуклой. Приравнявая к нулю ее производную, получим, что минимальное значение функции Лагранжа доставляет неотрицательная функция (26). Далее, можно показать [4, с. 63], что функция (26) принадлежит пространству $L_q[t_0, p]$.

Возьмем число ε и функцию $\varphi(t)$, которые удовлетворяют условиям (19). Тогда, используя формулу интегрирования по частям в интеграле Римана–Стилтьеса [12, с. 134], получим, что

$$\int_{t_0}^p \theta(r)(b(r) - \varphi(r)a(r)) dr - \theta(p)\varepsilon = \int_{t_0}^p \left(\int_t^p (b(r) - \varphi(r)a(r)) dr - \varepsilon \right) d\theta(r) \leq 0.$$

Следовательно,

$$\Lambda(\varepsilon, \varphi(\cdot)) \leq G(\varepsilon) + \int_{t_0}^p \varphi^q(r) dr.$$

Отсюда и из формул (23), (24) и (25) получим, что

$$G(\varepsilon_0) + \int_{t_0}^p \varphi_0^q(r) dr = \Lambda(\varepsilon_0, \varphi_0(\cdot)) \leq \Lambda(\varepsilon, \varphi(\cdot)) \leq G(\varepsilon) + \int_{t_0}^p \varphi^q(r) dr.$$

Теорема 5. Пусть выполнены условия теоремы 3 и, дополнительно, функция $G : [0, +\infty) \rightarrow R$ является выпуклой. Тогда существует решение $\varepsilon_0, \varphi_0(t)$ задачи (18), (19), для которого найдется число $\lambda \geq 0$ и неубывающая функция $\theta : [t_0, p] \rightarrow R$ с $\theta(t_0) = 0$, которые удовлетворяют условиям (23)–(26).

Доказательство. Поскольку $b(t) \geq 0$ при $t \in [t_0, p]$, то выполнено неравенство

$$|z(t_0)| + \int_{t_0}^p b(r) dr \geq 0. \tag{27}$$

Пусть в (27) стоит знак равенства. Тогда $|z(t_0)| = 0$ и $b(t) = 0$ для почти всех $t \in [t_0, p]$. Из формул (14) и (15) получим, что $\varepsilon_0 = 0$ и $\varphi_0(t) = 0$ удовлетворяют ограничением (19). Стало быть, они и будут являться решением задачи (18), (19). В этом случае, условия (23)–(26) выполнены при $\lambda = 0$ и $\theta(t) = 0$.

Рассмотрим случай, когда в (27) стоит знак строгого неравенства. Возьмем последовательность разбиений

$$\omega_i : t_0 = t_0^{(i)} < t_1^{(i)} < \dots < t_{k_i}^{(i)} < t_{k_i+1}^{(i)} = p,$$

диаметры $d(\omega_i)$ которых стремятся к нулю. Рассмотрим оптимизационную задачу

$$f_0(\varepsilon, \varphi(\cdot)) = G(\varepsilon) + \int_{t_0}^p \varphi^q(r) dr \rightarrow \min, \tag{28}$$

$$f_1(\varphi(\cdot)) \leq \varepsilon; \int_{t_j^{(i)}}^p (b(r) - \varphi(r)a(r)) dr \leq \varepsilon, j = \overline{1, k_i}; \tag{29}$$

$$\varepsilon \geq 0, \varphi(\cdot) \in L_q[t_0, p], \varphi(t) \geq 0 \text{ при } t \in [t_0, p]. \tag{30}$$

Ограничения (29), (30) являются совместными. Аналогично теореме 3 доказывается, что в задаче (28)–(30) существует решение $\varepsilon_i, \varphi_i(t)$. Эта задача является задачей выпуклого программирования, связи в которой удовлетворяют условию Слейтера. По теореме Куна–Таккера [13, с. 90–91] существует набор множителей Лагранжа $\lambda^{(i)} \geq 0, \lambda_j^{(i)} \geq 0, j = \overline{1, k_i}$, такой, что выполнены условия дополняющей нежесткости

$$\lambda^{(i)} \left(\int_{t_0}^p (b(r) - \varphi_i(r)a(r)) dr - \varepsilon_i + |z(t_0)| \right) = 0, \lambda_j^{(i)} \left(\int_{t_j^{(i)}}^p (b(r) - \varphi_i(r)a(r)) dr - \varepsilon_i \right) = 0, j = \overline{1, k_i} \tag{31}$$

и условие минимума функции Лагранжа $\Lambda_i(\varepsilon_i, \varphi_i(\cdot)) \leq \Lambda_i(\varepsilon, \varphi(\cdot))$ для любых ε и $\varphi(\cdot)$, которые удовлетворяют (30). Здесь

$$\Lambda_i(\varepsilon, \varphi(\cdot)) = G(\varepsilon) + \int_{t_0}^p \varphi^q(r) dr + \lambda^{(i)} \left(\int_{t_0}^p (b(r) - \varphi(r)a(r)) dr + |z(p)| - \varepsilon \right) + \sum_{j=1}^{k_i} \lambda_j^{(i)} \left(\int_{t_j^{(i)}}^p (b(r) - \varphi(r)a(r)) dr - \varepsilon \right).$$

Каждая из функций (32) не убывает на отрезке $[t_0, p]$ и удовлетворяет равенству $\theta_i(0) = 0$. Отсюда и из второго неравенства (35) получим, что $0 \leq \theta_i(t) \leq B$ для всех $t \in [t_0, p]$. Далее, полная вариация [8, с. 318] функции (32) равна $\theta_i(p) - \theta_i(t_0) \leq B$. Согласно второй теореме Хелли [8, с. 346], из последовательности функций (32) можно выделить подпоследовательность, сходящуюся в каждой точке отрезка $[t_0, p]$ к некоторой функции $\theta(t)$. Предельная функция не убывает и удовлетворяет равенству $\theta_0(t_0) = 0$.

Поскольку $0 \leq \lambda^{(i)} \leq B$, то из последовательности чисел $\lambda^{(i)}$ можно выделить сходящуюся подпоследовательность. Не вводя новых обозначений, считаем, что

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \theta_i(t) = \theta(t) \text{ для всех } t \in [t_0, p] \text{ и } \lim_{i \rightarrow \infty} \lambda^{(i)} = \lambda \geq 0. \quad (37)$$

Из формулы (34) получим, что

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \varphi_i(t) = \varphi_0(t) \text{ для любого } t \in [t_0, p],$$

где предельная функция $\varphi_0(t)$ задается формулой (26). Поэтому она принадлежит пространству $L_q[t_0, p]$.

Из формул (34) и (35) следует, что

$$0 \leq a(t)\varphi_i(t) \leq \left(\frac{2B}{q}\right)^{\frac{1}{1-q}} a^l(t) \text{ при всех } t \in [t_0, p]. \quad (38)$$

Зафиксируем число $t \in [t_0, p]$. Пусть $t_j^{(i)} \leq t < t_{j+1}^{(i)}$. Тогда из второго неравенства (29) получим, что

$$\varepsilon_i \geq \int_{t_j^{(i)}}^p (b(r) - \varphi_i(r)a(r)) dr = \int_t^p (b(r) - \varphi_i(r)a(r)) dr + \int_{t_j^{(i)}}^t \varphi_i(r)a(r) dr - \int_{t_j^{(i)}}^t b(r) dr. \quad (39)$$

Далее, учитывая, что диаметры $d(\omega_i) \rightarrow 0$, получим

$$0 \leq \int_{t_j^{(i)}}^t \varphi_i(r)a(r) dr \leq \left(\frac{2B}{q}\right)^{\frac{1}{q-1}} \int_{t_j^{(i)}}^t a^l(t) dr \rightarrow 0, \quad \int_{t_j^{(i)}}^t b(r) dr \rightarrow 0.$$

Здесь использованы неравенство (38) и теорема об абсолютной непрерывности интеграла Лебега [8, с. 282]. По теореме Лебега [8, с. 284],

$$\int_t^p (b(r) - \varphi_i(r)a(r)) dr \rightarrow \int_t^p (b(r) - \varphi_0(r)a(r)) dr.$$

Поэтому из неравенства (39) следует, что

$$\int_t^p (b(r) - \varphi_0(r)a(r)) dr \leq \varepsilon_0 \text{ при любом } t \in [t_0, p].$$

Стало быть, ε_0 и $\varphi_0(t)$ удовлетворяют неравенству (15). Аналогично из теоремы Лебега получим, что они удовлетворяют неравенству (14). Таким образом, число ε_0 и функция $\varphi_0 : [t_0, p] \rightarrow R$ удовлетворяют условиям (19).

Перейдем к пределу в первом равенстве (31). Получим равенство (24). Просуммируем по j вторые равенства в (31) и учтем вид функции (32). Будем иметь

$$\int_{t_0}^p \theta_i(r)(b(r) - \varphi_i(r)a(r)) dr - \theta_i(p)\varepsilon_i = 0. \quad (40)$$

Из формулы (34) следует, что

$$0 \leq \varphi_i(t)a(t)\theta_i(t) \leq a^l(t) \left(\frac{\lambda^{(i)} + \theta_i(t)}{q}\right)^{\frac{1}{q-1}} \theta_i(t) \leq a^l(t) \left(\frac{2B}{q}\right)^{\frac{1}{q-1}} B.$$

Поэтому, переходя в равенстве (40) к пределу и применяя теорему Лебега, получим равенство (23). Аналогично, переходя в первом равенстве (31) к пределу и учитывая второе соотношение в (37), получим равенство (24). Зафиксируем число $\varepsilon \geq 0$ и перейдем к пределу в неравенстве (33). Получим неравенство (25).

Отметим, что по теореме 4 найденные ε_0 и $\varphi_0(t)$ являются решением задачи (18), (19).

Работа выполнена при поддержке гранта Фонда перспективных научных исследований ФГБОУ ВО «ЧелГУ» (2017 г.).

Литература

1. Красовский, Н.Н. Позиционные дифференциальные игры / Н.Н. Красовский, А.И. Субботин. – М.: Наука, 1974. – 456 с.
2. Айзекс, Р. Дифференциальные игры / Р. Айзекс. – М.: Мир, 1967. – 479 с.
3. Понтрягин, Л.С. Линейные дифференциальные игры преследования / Л.С. Понтрягин // Мат. сб. Новая серия. – 1980. – Т. 112, № 3. – С. 307–330.
4. Ухоботов, В.И. Метод одномерного проектирования в линейных дифференциальных играх с интегральными ограничениями: учебное пособие / В.И. Ухоботов. – Челябинск: Челяб. гос. ун-т. – 2005. – 124 с.
5. Ухоботов, В.И. Однотипные дифференциальные игры с выпуклой целью / В.И. Ухоботов // Тр. ИММ УрО РАН. – 2010. – Т. 16, № 5. – С.196–204.
6. Ухоботов, В.И. Однотипные дифференциальные игры с выпуклой интегральной платой / В.И. Ухоботов, Д.В. Гушин // Тр. ИММ УрО РАН. – 2011. – Т. 17, № 1. – С. 251–258.
7. Красовский, Н.Н. Теория управления движением / Н.Н. Красовский. – М.: Наука, 1968. – 475 с.
8. Колмогоров, А.Н. Элементы теории функций и функционального анализа / А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин. – М.: Наука, 1972. – 496 с.
9. Кудрявцев, Л.Д. Курс математического анализа. Т.1. / Л.Д. Кудрявцев. – М.: Высшая школа, 1981. – 687 с.
10. Пшеничный, Б.Н. Выпуклый анализ и экстремальные задачи / Б.Н. Пшеничный. – М.: Наука, 1980. – 319 с.
11. Люстерник, Л.А. Элементы функционального анализа / Л.А. Люстерник, В.И. Соболев. – М.: Наука, 1965. – 520 с.
12. Рисс, Ф. Лекции по функциональному анализу / Ф. Рисс, Б. Секельфальви-Надь. – М.: Наука, 1979. – 587 с.
13. Иоффе, А.Д. Теория экстремальных задач / А.Д. Иоффе, В.М. Тихомиров. – М.: Наука, 1974. – 479 с.

Поступила в редакцию 2 марта 2017 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2017, vol. 9, no. 2, pp. 36–46*

DOI: 10.14529/mmp170205

ON A LINEAR CONTROL PROBLEM UNDER INTERFERENCE

V.I. Ukhobotov

*Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E-mail: ukh@csu.ru*

This paper considers a linear control problem under the action of uncontrolled interference. The control process occurs in a given time interval. The possible values of interference belong to a compact set. The control is sought as the product of a scalar function and a vector function. Values of the vector function belong to a connected symmetric compact. This definition of control arises in control problems for mechanical systems of variable composition. For example, the law of variation of a reaction mass is

defined as a function of time, and the control affects the direction of relative velocity in which the mass is separated. The terminal part of the board depends on the modulus of a linear function of the state vector. The integral part of the board is an integral over the interval of a degree of the scalar function. The control problem is considered within the theory of guaranteed result optimization. With the help of a linear change of variables, the control problem comes down to a one-type differential game. An optimal control existence theorem is proved under rather wide constraints on the class of problems. Necessary and sufficient conditions are found, under which an admissible control is optimal.

Keywords: control; interference; differential game.

References

1. Krasovskij N.N., Subbotin A.I. *Pozicionnye differencial'nye igry* [Positional differential games]. Moscow, Nauka Publ., 1974, 456 p. (in Russ.).
2. Ajzeks R. *Differencial'nye igry* (Differential games). Moscow, Mir, 1967. 479 p. (in Russ.). [Isaacs R. *Differential games: A Mathematical Theory with Applications to Warfare and Pursuit, Control and Optimization*. New York: John Wiley and Sons, Inc., 1965, 384 p.]
3. Pontryagin L.S. Linear differential games of pursuit. *Math. USSR-Sb.*, 1981, Vol. 40, no. 3, pp. 285–303. DOI: 10.1070/SM1981v040n03ABEH001815
4. Ukhobotov V.I. *Metod odnomernogo proektirovaniya v lineynykh differentsial'nykh igrakh s integral'nymi ogranicheniyami: uchebnoe posobie* (Method of one-dimensional design in linear differential games with integral constraints: textbook). Chelyabinsk, Chelyabinskiy gosudarstvennyy universitet Publ., 2005, 124 p. (in Russ.).
5. Ukhobotov V.I. Odnopnye differencial'nye igry s vypukloj cel'ju [The same type of differential games with convex purpose]. *Trudy Instituta Matematiki I Mehaniki Uro RAN*, 2010, Vol. 16, no. 5, pp. 196–204.
6. Ukhobotov V.I., Gushchin D.V. Single-type differential games with convex integral. *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics*, 2011, Vol. 275, suppl. 1, pp. 178–185. DOI: 10.1134/S0081543811090136
7. Krasovskii N.N. *Teoriia upravleniia dvizheniem* (Motion control theory). Moscow, Nauka Publ., 1970, 420 p. (in Russ.).
8. Kolmogorov A.N., Fomin S.V. *Elementy teorii funktsii i funktsional'nogo analiza* (Elements of function theory and functional analysis). Moscow, Nauka Publ., 1972, 496 p. (in Russ.).
9. Kudryavtsev L.D. *Kurs matematicheskogo analiza* (Course of mathematical analysis). Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1981, Vol. 1, 687 p. (in Russ.).
10. Pshenichnyy B.N. *Vypuklyy analiz I ekstremal'nye zadachi* (Convex analysis and extremum problems). Moscow, Nauka Publ., 1980, 320 p. (in Russ.).
11. Ljusternik L.A., Sobolev V.I. *Jelementy funktsional'nogo analiza* (Elements of functional analysis). Moscow, Nauka Publ., 1965, 520 p. (in Russ.).
12. Riss F., Sekel'fal'vi-Nad' B. *Leksii po funktsional'nomu analizu* (Lectures of functional analysis). Moscow, Nauka Publ., 1979, 287 p. (in Russ.). [Riesz F., Sz.-Nagy B. *Leçons d'analyse fonctionnelle*. Budapest, Akademiai Kiado, 1972, 588 p.]
13. Ioffe A.D., Tihomirov V.M. *Teoriya ekstremal'nykh zadach* (Theory of extremum problems). Moscow, Nauka Publ., 1974, 479 p. (in Russ.).

Received March 2, 2017

О ВЛИЯНИИ ЗАВИСИМОСТИ ВЯЗКОСТИ ОТ ТЕМПЕРАТУРЫ НА СТАЦИОНАРНЫЕ КОНВЕКТИВНЫЕ ТЕЧЕНИЯ В ЯЧЕЙКЕ ХЕЛЕ–ШОУ

В.А. Демин, М.И. Петухов

Пермский государственный национальный исследовательский университет, г. Пермь, Российская Федерация

E-mail: demin@psu.ru

Представлены результаты численного моделирования стационарных конвективных течений в ячейке Хеле–Шоу при подогреве снизу. Выполнен линейный анализ устойчивости механического равновесия и проанализирован переход от одновихревого течения к двухвихревому при учете в математической модели зависимости вязкости жидкости от температуры. Для различных вариантов тепловых граничных условий получены поля функции тока при разных числах Рэлея, по которым определены сценарии интенсификации конвекции с ростом надкритичности.

Ключевые слова: ячейка Хеле–Шоу; подогрев снизу; стационарные режимы; неоднородность вязкости.

Введение. В работе проведено численное исследование влияния неоднородности вязкости и тепловых граничных условий на стационарные конвективные движения в вертикально ориентированной ячейке Хеле–Шоу при равномерном подогреве снизу. В рассматриваемых условиях при небольших перепадах температуры в жидкости имеет место механическое равновесие, а при малых надкритичностях возникают стационарные одно- или двухвихревые конвективные движения жидкости, область существования которых и форма исследовались в данной работе. Впервые обстоятельное экспериментальное наблюдение различных ламинарных конвективных режимов в подогреваемой снизу вертикальной ячейке Хеле–Шоу проводилось в работе [1]. Линейный анализ устойчивости течений в случае идеально теплопроводных широких граней был выполнен в [2]. Однако, из-за специфических тепловых условий на широких гранях и выбранного соотношения сторон 2:10:20, последовательность регулярных режимов оказалась достаточно простой. После прохождения порога устойчивости равновесия в системе сначала рождался одновихревой стационарный режим. По мере увеличения надкритичности ось симметрии основного вихря начинала отклоняться, а скорость вращения расти. В определенный момент система проходила точку бифуркации, в которой рождался автоколебательный четырехвихревой режим с переключением угловых вихрей.

Позднее последовала серия экспериментальных и теоретических работ [3–5], в которых использовалась полость с соотношением сторон 2:20:40 и было обнаружено значительно большее разнообразие как переходных, так и устойчивых конвективных течений. В частности был обнаружен и описан новый, так называемый пульсационный режим, колебательное поведение которого проистекает из неустойчивости стационарного двухвихревого течения, когда спонтанно один вихрь начинает доминировать над другим. В какой-то момент большой вихрь целиком поглощает маленький, и течение на время становится одновихревым. Затем на фоне одновихревого течения в одном из нижних углов полости рождается небольшой вихрь противоположной закрутки. Этот вихрь со временем растет, достигает в размерах примерно 1/3 высоты полости, и, взаимодействуя с основным течением, в некоторый момент времени опять поглощается им. Через некоторый промежуток времени этот процесс повторяется. В итоге наблюдаются пульсации нижнего вихря на фоне основного одновихревого течения.

Эксперименты, проведенные на трансформаторном масле, привели к нетривиальному результату. Оказалось, что автоколебательное четырехвихревое течение характеризуется разными по величине верхними и нижними вихрями, что было объяснено в [5] наличием у данной жидкости сильной зависимости вязкости от температуры. В тоже время в отмеченных работах не обра-

шалось внимания на другие возможные проявления зависимости вязкости от температуры в ячейке Хеле–Шоу, например, на роль этого эффекта при небольших надкритичностях, когда имеют место стационарные конвективные движения. Целью данной работы является исследование влияния неоднородности вязкости на образование экспериментально наблюдаемого двухвихревого течения с однозначно определенной закруткой вихрей. Как будет показано ниже, на установление подъемно-опускного течения в ячейке Хеле–Шоу с восходящим движением вдоль узких вертикальных граней влияет два фактора: зависимость вязкости от температуры и тепловое взаимодействие жидкости с боковыми границами полости. Для приложений этот обнаруженный эффект может оказаться важным, так как в инженерных науках всегда приходится иметь дело с полостями конечных размеров.

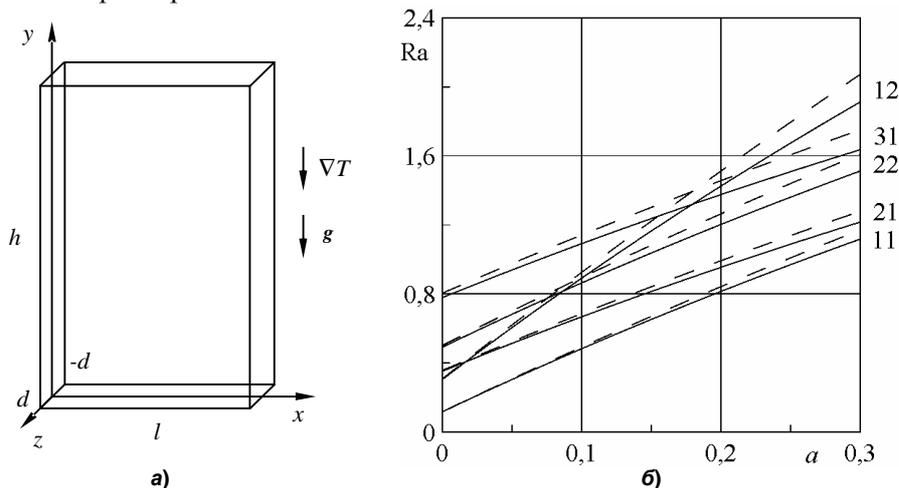


Рис. 1. Ячейка Хеле–Шоу (а). Пороги устойчивости механического равновесия для первых пяти гидродинамических мод (б) для двух значений ε . Сплошные и штриховые линии отвечают, соответственно, однородной и неоднородной вязкости

1. Постановка задачи. Ячейка Хеле–Шоу представляет собой полость в форме прямоугольного параллелепипеда, одна из сторон которого много меньше двух других (рис. 1, а). По причинам, упомянутым выше, будем рассматривать ячейку с соотношением сторон $2d:l:h = 2:20:40$; d, l, h – размерные толщина, длина и высота полости. Изучим конвективное поведение рабочей жидкости, находящейся в условиях равномерного нагрева снизу при наличии поля тяжести. При этом предполагается, что вязкость уменьшается с ростом температуры [6] по линейному закону $\nu = \nu_0(1 - \varepsilon T)$, где ε – размерный коэффициент зависимости вязкости от температуры.

В качестве граничных условий рассмотрим два случая: 1) теплоизолированные и 2) идеально теплопроводные узкие вертикальные грани. На верхнем и нижнем теплообменниках поддерживалась определенная разность температур. Широкие грани обладают конечной теплопроводностью, так чтобы имелось максимальное соответствие эксперименту, в котором полость была ограничена плексигласовыми пластинами толщиной $2 \div 3$ см.

Для численного моделирования конвективных течений использовалась система уравнений тепловой конвекции в приближении Буссинеска [6] при наличии неоднородности вязкости:

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \frac{1}{\text{Pr}}(\mathbf{v}\nabla)\mathbf{v} = -\nabla p + (1 - kT)\Delta\mathbf{v} - 2k(\nabla T\nabla)\mathbf{v} - k\nabla T \times \text{rot}\mathbf{v} + \text{Ra}T\boldsymbol{\gamma}, \quad (1)$$

$$\text{Pr} \frac{\partial T}{\partial t} + (\mathbf{v}\nabla)T = \Delta T, \text{div}\mathbf{v} = 0. \quad (2)$$

Здесь \mathbf{v}, p, T – безразмерные поля скорости, давления и температуры, $\boldsymbol{\gamma}$ – единичный вектор, направленный вертикально вверх. Система уравнений содержит безразмерные управляющие параметры: числа Рэлея и Прандтля, а также параметр, характеризующий зависимость вязкости от температуры: $\text{Ra} = g\beta\Theta d^3/\nu_0\chi$, $\text{Pr} = \nu_0/\chi$, $k = \varepsilon\Theta$, где ν_0 – коэффициент кинематической вязкости в реперной точке; χ, β – коэффициенты температуропроводности и теплового расширения, Θ – характерная разность температур на расстоянии, равном полутолщине слоя d , g – величина ускорения свободного падения. Дополнительными безразмерными параметрами являются длина и

высота полости: $L = l/d$, $H = h/d$. За единицы измерения расстояния, времени, скорости, давления и температуры выбраны, соответственно: d , d^2/ν_0 , χ/d , $\rho\nu_0\chi/d^2$, Θ (ρ – средняя плотность жидкости). Число Прандтля в расчетах для простоты принималось равным $Pr = 6$, что приближенно соответствует воде.

Система уравнений (1)–(2) предполагает использование приближения плоских траекторий, следовательно, можно ввести функцию тока $v_x = \partial\Psi/\partial y$, $v_y = -\partial\Psi/\partial x$. После исключения давления и получения уравнений в терминах «вихрь – функция тока» решение системы искалось в виде $\Psi = \psi(x, y, t) \cos(\pi z/2)$. На границах полости выполнялось условие прилипания жидкости. У поля температуры выделялась равновесная линейная часть: $T = -y + T'$, где $T' = \theta(x, y, t) \left(1 + 2a\pi^{-1} \cos(\pi z/2)\right)$. Граничное условие для температуры на широких гранях имеет вид: $\partial T'/\partial z|_{\Gamma} = -a(T' - T_0)$, где $a = \lambda_m/\lambda_f D$ – безразмерный коэффициент теплоотдачи, λ_m , λ_f – коэффициенты теплопроводности массива и жидкости, соответственно, D – безразмерная толщина массива, T_0 – температура окружающей среды, которая в данной задаче бралась за начало отсчета. Уравнения усреднялись по z , после чего подлежали определению ψ и θ , т.е. поля амплитуд функции тока и отклонения температуры от линейного профиля. Уравнения для амплитуд и начально-краевые условия имеют вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = & \frac{8}{3\pi Pr} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \varphi}{\partial y} - \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \left(1 + ky - k \left(1 + \frac{16a}{3\pi^2} \right) \theta \right) \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} - \frac{\pi^2}{4} \varphi \right) + \\ & + k \left(\left(1 + \frac{16a}{3\pi^2} \right) \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right) \varphi + \frac{\pi^2}{4} \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) \right) - \frac{\pi^2}{4} \frac{\partial \psi}{\partial y} - \\ & - \frac{2}{3} a \left(\varphi \theta + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \theta}{\partial y} \right) - 2k \left(1 + \frac{16a}{3\pi^2} \right) \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial x} + \frac{\partial \varphi}{\partial y} \frac{\partial \theta}{\partial y} - \right. \\ & \left. - \frac{3\pi^2}{3\pi^2 + 16a} \frac{\partial \varphi}{\partial y} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} + 2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x \partial y} \frac{\partial^2 \theta}{\partial x \partial y} \right) - \frac{2(2+a)}{\pi} Ra \frac{\partial \theta}{\partial x}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} Pr \left(1 + \frac{2a(4+a)}{\pi^2} \right) \frac{\partial \theta}{\partial t} = & \frac{2}{\pi} \left(1 + a + \frac{8a^2}{3\pi^2} \right) \left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial \theta}{\partial y} - \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial \theta}{\partial x} \right) - \frac{2+a}{\pi} \frac{\partial \psi}{\partial x} + \\ & + \left(1 + \frac{2a(4+a)}{\pi^2} \right) \left(\frac{\partial^2 \theta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \theta}{\partial y^2} \right) - \frac{a(2+a)}{2} \theta, \end{aligned} \quad (4)$$

где введено следующее обозначение $\varphi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2}$;

$$t = 0: \quad \psi = \varphi = \theta = 0; \quad (5)$$

$$y = 0, H: \quad \theta = 0, \quad \psi = \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0; \quad x = 0, L: \quad \psi = \frac{\partial \psi}{\partial y} = 0; \quad (6)$$

идеально теплопроводные узкие вертикальные грани: $\theta = 0$;

$$\text{теплоизолированные узкие вертикальные грани: } \frac{\partial \theta}{\partial y} = 0.$$

2. Линейный анализ устойчивости. Чтобы оценить влияние коэффициента теплоотдачи на течение, а также для выбора наиболее близкого к эксперименту [4] значения этого параметра (сравнение велось по пороговому значению моды 1,1), сначала была аналитически решена задача линейной устойчивости механического равновесия. Для произвольных k граница устойчивости имеет вид:

$$Ra_{nm} = \frac{\pi^4 L^2}{n^2} \left(1 + \frac{H}{2} k \right) \left(\left(\frac{n}{L} \right)^2 + \left(\frac{m}{H} \right)^2 \right)^2 \left(\left(\frac{n}{L} \right)^2 + \left(\frac{m}{H} \right)^2 + \frac{1}{4} \right) \times$$

$$\times \left(\frac{\pi^2 + 4a}{2(2+a)^2} + \frac{a}{2+a} \left(1 + \frac{1}{4} \left(\left(\frac{n}{L} \right)^2 + \left(\frac{m}{H} \right)^2 \right)^{-1} \right) \right).$$

Здесь m и n – целые числа, определяющие периодичность возмущений по осям x и y . Найденные значения критического числа Рэлея в пределе $k = 0$ совпадают с известными случаями теплоизолированных ($a = 0$) и идеально теплопроводных широких граней ($a = \infty$). Графически значения первых пяти гидродинамических мод в исследованном диапазоне коэффициента теплоотдачи представлены на рис. 1б. Все дальнейшие расчеты проводились при $a = 0,2$, что примерно соответствует плексигласу при толщине стенок 2 см. Пороговым значением числа Рэлея для данного коэффициента теплоотдачи является $Ra \approx 0,9$.

3. Метод решения нелинейной задачи. Для анализа полных нелинейных уравнений (3)–(4) применялся метод конечных разностей. Краевая задача (3)–(6) в терминах конечных разностей с учетом обозначений школы А.А. Самарского [7, 8] записывается в форме

$$\begin{aligned} \varphi_t = & \frac{8}{3\pi Pr} \left(\psi_x \varphi_y - \psi_y \varphi_x \right) + \left(1 + ky - k \left(1 + \frac{16a}{3\pi^2} \right) \theta \right) \left(\varphi_{x\bar{x}} + \varphi_{y\bar{y}} - \frac{\pi^2}{4} \varphi \right) + \\ & + k \left(\left(1 + \frac{16a}{3\pi^2} \right) \left(\theta_{x\bar{x}} + \theta_{y\bar{y}} \right) \varphi + \frac{\pi^2}{4} \left(\psi_x \theta_x + \psi_y \theta_y \right) \right) - \frac{\pi^2}{4} \psi_y - \\ & - \frac{2}{3} a \left(\varphi \theta + \psi_x \theta_x + \psi_y \theta_y \right) - 2k \left(1 + \frac{16a}{3\pi^2} \right) \left(\varphi_x \theta_x + \varphi_y \theta_y - \right. \\ & \left. - \frac{3\pi^2}{3\pi^2 + 16a} \varphi_y + \psi_{x\bar{x}} \theta_{x\bar{x}} + \psi_{y\bar{y}} \theta_{y\bar{y}} + 2\psi_{xy} \theta_{xy} \right) - \frac{2(2+a)}{\pi} Ra \theta_x, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} Pr \left(1 + \frac{2a(4+a)}{\pi^2} \right) \theta_t = & \frac{2}{\pi} \left(1 + a + \frac{8a^2}{3\pi^2} \right) \left(\psi_x \theta_y - \psi_y \theta_x \right) - \frac{2+a}{\pi} \psi_x + \\ & + \left(1 + \frac{2a(4+a)}{\pi^2} \right) \left(\theta_{x\bar{x}} + \theta_{y\bar{y}} \right) - \frac{a(2+a)}{2} \theta, \end{aligned} \quad (8)$$

$$y = 0, H: \theta_{i,1}^n = 0, \theta_{i,N2}^n = 0, \psi_{i1}^n = \psi_{iN2}^n = 0, \varphi_{i,1}^n = 2\psi_{i,2}^n / h_y^2, \varphi_{i,N2}^n = 2\psi_{i,N2-1}^n / h_y^2; \quad (9)$$

$$x = 0, L: \psi_{1,j}^n = \psi_{N1,j}^n = 0, \varphi_{1,j}^n = 2\psi_{2,j}^n / h_x^2, \varphi_{N1,j}^n = 2\psi_{N1-1,j}^n / h_x^2; \quad (10)$$

теплопроводные узкие вертикальные грани $\theta_{1,j}^n = 0, \theta_{N1,j}^n = 0$;

теплоизолированные узкие вертикальные грани $\theta_{1,j}^n = \theta_{2,j}^n, \theta_{N1,j}^n = \theta_{N1-1,j}^n$.

Здесь $\varphi = \psi_{x\bar{x}} + \psi_{y\bar{y}}$ – с точностью до знака вихрь скорости; i, j – номера узлов, а $N1, N2$ – их число по x и y . Для φ на границах использовались формулы Тома [8]. Введенные обозначения для конечных разностей отвечают следующим односторонним и центральным разностям

$$f_t = \frac{f_{i,j}^{n+1} - f_{i,j}^n}{\tau}, f_x = \frac{f_{i+1,j}^n - f_{i-1,j}^n}{2h_x}, f_x = \frac{f_{i+1,j}^n - f_{i,j}^n}{h_x}, f_{\bar{x}} = \frac{f_{i,j}^n - f_{i-1,j}^n}{h_x}.$$

Здесь τ, h_x, h_y – шаги по времени и координатам x, y . Таким образом, алгоритм был разработан в соответствии с явной схемой решения уравнений в частных производных и основан на двухполевой методике [8]. При аппроксимации производных по времени и производных по координатам использовались, соответственно, односторонние и центральные разности. Расчет начинался с числа Рэлея, соответствующего равновесию. Таким образом, система стартовала из состояния покоя. В ходе пошагового изменения числа Рэлея в качестве начальных условий использовались поля в предыдущий момент времени, т.е. применялся метод продолжения по параметру. Это позволяло имитировать эксперимент, в котором постепенно после фиксации установившегося режима последовательно малыми шагами увеличивалась разность температур на теплообменниках.

Шаг по времени выбирался из соображений устойчивости численной процедуры. При решении уравнения Пуассона для функции тока в каждый момент времени применялся метод простых итераций. Рабочее количество узлов в сечении канала было равно 25×49 . В ходе расчетов использовался метод установления. Компьютерный код был реализован на языке программирования FORTRAN-90. Система уравнений (7), (8) с граничными условиями (9), (10) решалась на суперкомпьютере «ПГУ–Тесла» Научно-образовательного центра Пермского государственного национального исследовательского университета «Параллельные и распределенные вычисления».

4. Результаты расчета в случае однородной вязкости. Сначала проанализируем результаты численного моделирования стационарных течений в ячейке Хеле–Шоу в пределе $\varepsilon = 0$ (однородная вязкость). Пусть для определенности узкие вертикальные грани теплоизолированы.

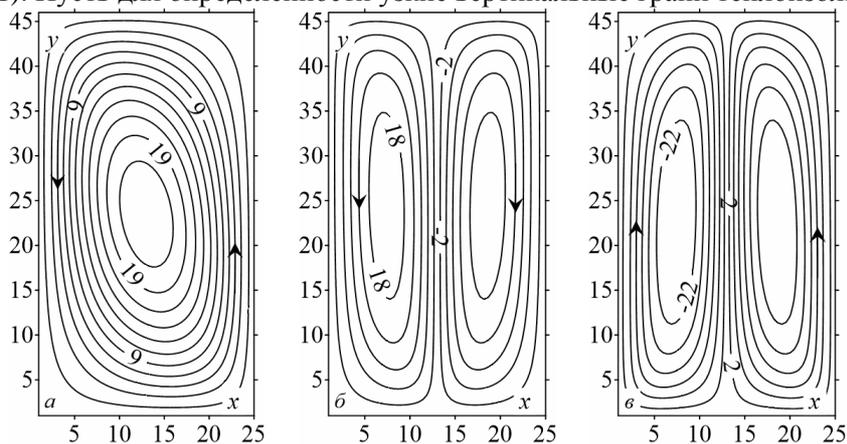


Рис. 2. Поля функций тока стационарных конвективных течений для случая однородной вязкости, а) – одновихревой режим при $Ra = 1,6$; б) и в) – соответственно двухвихревые режимы с подъемным и опускным течением в середине полости при $Ra = 2,7$

В соответствии с линейным анализом устойчивости при прохождении порогового значения $Ra \approx 0,8$, в ячейке рождается одновихревой стационарный режим (рис. 2, а). При увеличении надкритичности ось симметрии основного вихря наклоняется, а в углах появляются небольшие застойные зоны, что сначала неплохо согласуется с экспериментом (рис. 3, а, [4]). Однако, имитируя в ходе численного моделирования эксперимент, а именно, медленно продвигаясь вверх по параметру, одновихревое течение при $\varepsilon = 0$ может сохранять свою устойчивость вплоть до $Ra = 1,9$, после чего в системе сразу рождается автоколебательный пульсационный режим. Появление моды (2,1) при $Ra \approx 1,0$ (рис. 1, б) и ее нелинейное взаимодействие с основной модой (1,1) не приводит к перестройке течения, т.е. мода (1,1) остается доминирующей. Это противоречит опытам, в которых одновихревой стационарный режим теряет устойчивость и переходит в двухвихревой при $Ra \approx 1,5$ (рис. 3, в). В дополнение, чем более выраженной в эксперименте является зависимость вязкости от температуры, тем сильнее центры вихрей смещаются к низу полости [4], т.е. симметрия «верх-низ» течения нарушается, чего нет на рис. 2, б и 2, в. Еще одно противоречие связано с тем, что в расчетах, задавая начальные условия для двухвихревого движения с разной закруткой, можно на равных правах реализовать оба режима (рис. 2, б; 2, в). В то время как в эксперименте двухвихревое течение всегда характеризовалось опускным движением в центре и подъемом жидкости по бокам полости. Таким образом, можно заключить, что динамика переходов от одного режима к другому, не совсем адекватно описывается стандартными уравнениями тепловой конвекции в приближении Буссинеска. Для полноты описания было проведено численное моделирование стационарных течений в ячейке Хеле–Шоу в случае идеально теплопроводных узких вертикальных граней. Оно показало, что теплопроводность узких вертикальных граней играет немаловажную роль при формировании сценария усложнения конвективных течений в ячейке Хеле–Шоу. Однако оказалось, что пороги возникновения режимов плохо согласуются с экспериментом, и в зависимости от начальных условий может быть реализовано двухвихревое течение с обоими вариантами закрутки вихрей.

5. Результаты для неоднородной вязкости. Представим результаты расчетов для $\varepsilon = 0,02$ 1/К, что примерно соответствует воде при температуре 20°C . При использовании граничных условий, соответствующих идеально теплопроводным узким вертикальным граням, пороговое

число Рэлея имеет значение $Ra \approx 1,2$ и дает несколько завышенное значение нежели в опыте. После рождается одновихревой стационарный режим (рис. 4, а). С ростом числа Рэлея симметрия этого течения нарушается, а именно, в углах ячейки образуются вихри с противоположной основному течению закруткой (рис. 4, б). В силу неоднородности вязкости нижний вихрь всегда немного больше верхнего. Поскольку в экспериментах как правило рабочей жидкостью было трансформаторное масло, у которого ε в разы больше, чем у воды, эффект подобного нарушения симметрии при больших числах Прандтля выражен сильнее.

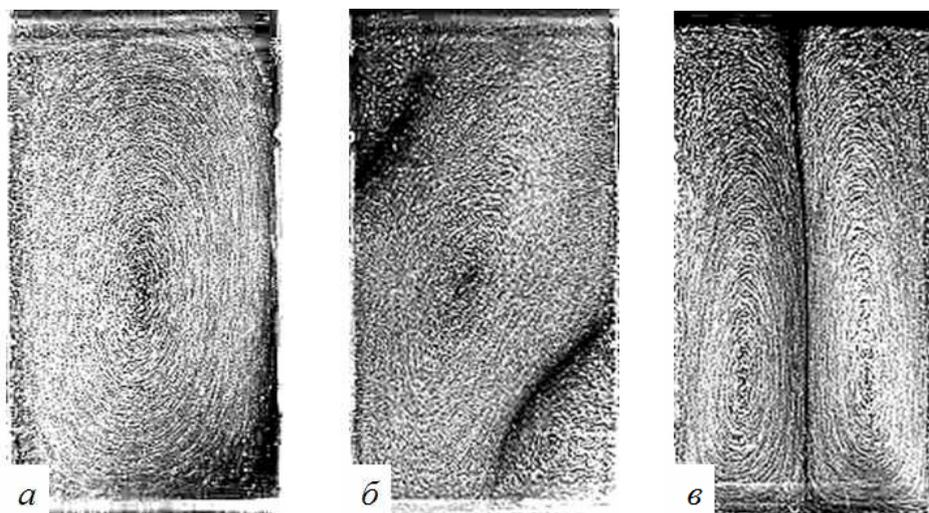


Рис. 3. Течения, наблюдавшиеся в эксперименте [4]: а) и б) – одновихревой режим при $Ra = 0,9$ и $1,4$; в) – двухвихревой режим при $Ra = 1,5$

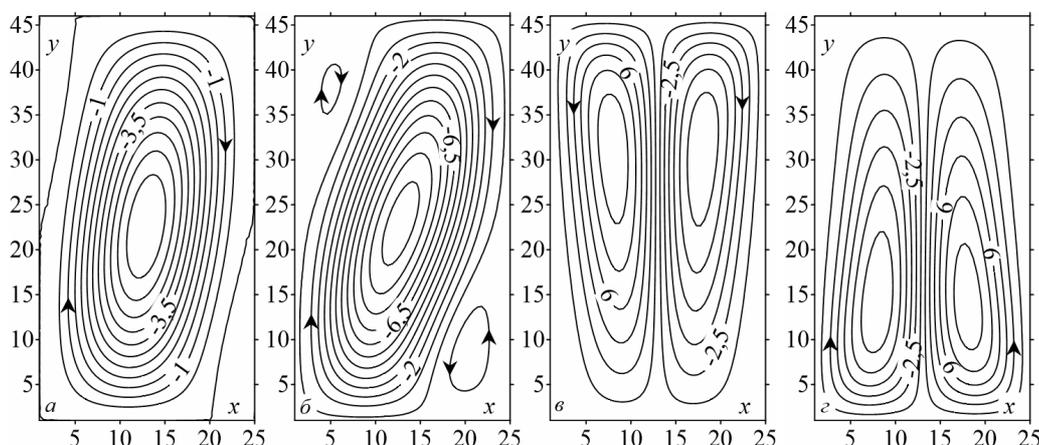


Рис. 4. Поля функций тока стационарных конвективных течений для идеально теплопроводных узких граней в случае неоднородной вязкости; а) и б) одновихревой режим при $Ra = 1,2$ и $Ra = 1,4$; в) и з) двухвихревые режимы с «не экспериментальной» и «экспериментальной» закруткой при $Ra = 1,8$

Увеличение надкритичности приводит к тому, что при прохождении $Ra = 1,6$ система проходит точку бифуркации, в которой нижний угловой вихрь начинает вытеснять основное течение. В свою очередь, основное течение поглощает верхний угловой вихрь. В ходе такой перестройки в ячейке остаются два симметричных вихря с экспериментальной закруткой (рис. 4, з). Такой переход от одного режима к другому из-за отсутствия симметрии между угловыми вихрями теперь является единственно возможным. Второй фактор, подтверждающий роль зависимости вязкости от температуры заключается в воспроизводстве эффекта смещения центров вихрей в нижнюю часть полости (рис. 3, в и 4, з). Следует отметить, что в расчетах все же можно получить два типа двухвихревых течений с обеими закрутками (рис. 4, в; 4, з). Однако для этого требуется искусственно создать движение с противоположной закруткой и соответствующей симметрией. Это искусственно созданное движение имеет конечную амплитуду и не может быть реализовано обычными средствами в ходе эксперимента.

Заключение. По результатам численного моделирования показано, что включение в математическую модель условия теплоотдачи на широких вертикальных гранях и учет неоднородности вязкости позволяют адекватно описать стационарные конвективные режимы в ячейке Хеле – Шоу при подогреве снизу. Значения критических чисел Рэлея, отвечающие смене одно- и двухвихревого режимов хорошо согласуются с экспериментом. Выявлено, что учет неоднородности вязкости приводит к тому, что при переходе от одно- к двухвихревому режиму вытеснять основное течение будет именно нижний угловой вихрь, закрутка которого приводит к подъемному движению вдоль боковых граней, а не наоборот.

Литература

1. Путин, Г.Ф. Экспериментальное исследование надкритических конвективных движений в ячейке Хеле–Шоу / Г.Ф. Путин, Е.А. Ткачева // Изв. АН СССР. МЖГ. – 1979. – № 1. – С. 3–8.
2. Любимов, Д.В. Конвекция в ячейке Хеле–Шоу при подогреве снизу / Д.В. Любимов, Г.Ф. Путин, В.И. Чернатыйский // Гидродинамика: сб. науч. тр. – Пермь, Изд-во Пермск. ун-та. 1977. – Вып. 10. – С. 3–14.
3. Бабушкин, И.А. Экспериментальное и теоретическое исследование переходных конвективных режимов в ячейке Хеле–Шоу / И.А. Бабушкин, В.А. Демин // Изв. РАН, МЖГ. – 2006. – № 3. – С. 3–10.
4. Babushkin, I.A. Experimental and theoretical investigation of transitional convective flows in Hele–Shaw cell / I.A. Babushkin, V.A. Demin, D.V. Anferov // Proceeding of International Conference. «Advanced Problems in Thermal Convection». – Perm, Russia, 2004. – P. 173–178.
5. Об изменчивости одного типичного течения в ячейке Хеле–Шоу / И.А. Бабушкин, В.А. Демин, И.В. Глазкин // Изв. РАН. МЖГ. – 2009. – № 5. – С. 3–14.
6. Гершуни, Г.З. Устойчивость конвективных течений / Г.З. Гершуни, Е.М. Жуховицкий, А.А. Непомнящий. – М.: Наука, 1989. – 320 с.
7. Самарский, А.А. Теория разностных схем / А.А. Самарский. – М.: Наука, 1977. – 656 с.
8. Тарунин, Е.Л. Вычислительный эксперимент в задачах свободной конвекции / Е.Л. Тарунин. – Иркутск: изд-во Иркут. ун-та, 1990. – 228 с.

Поступила в редакцию 10 февраля 2017 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series “Mathematics. Mechanics. Physics”
2017, vol. 9, no. 2, pp. 47–54*

DOI: 10.14529/mmph170206

THE EFFECT OF TEMPERATURE DEPENDENCE OF THE VISCOSITY ON STATIONARY CONVECTIVE FLOWS IN HELE–SHAW CELL

V.A. Demin, M.I. Petukhov

Perm State National Research University, Perm, Russian Federation

E-mail: demin@psu.ru

The results of direct numerical simulation of stationary convective flows in a vertical Hele–Shaw cell under the uniform heating from below are presented in this paper. The calculations have been fulfilled for realistic values of the heat-transfer coefficient on vertical wide boundaries and model thermal conditions on narrow vertical walls. The approximation of plane trajectories has been applied to calculate the flows in the Hele–Shaw cell. The linear stability analysis is executed for the situation when the viscosity depends on the temperature. An analytical formula for critical values of Rayleigh number has been deduced which determine the threshold of convection in dependence on parameters of the problem. It has been shown that the numerical simulation imitating the full-scale experiment gives adequate description of the transition from one-vortex stationary flow to the two-vortex steady regime when the dependence of viscosity on the temperature is taken into account in mathematical model. The equations system of thermal convection in Boussinesq approximation was solved by the method of finite

differences at the “PGU-Tesla” supercomputer of the Research Academic Center “Parallel and Distributed Calculations” in Perm State University. The fields of stream function in vertical section have been calculated which confirm the effect of the vortices centers displacement to the bottom of the cavity.

Keywords: Hele–Shaw cell; heating from below; stationary regimes; non-homogeneity of viscosity.

References

1. Putin G.F., Tkacheva E.A. *Izvestia RAN, Mekhanika Zhidkosti i Gaza*, 1979, no. 1, pp. 3–8. (in Russ.).
2. Lyubimov D.V., Putin G.F., Chernatynskiy V.I. *Gidrodinamika*, 1977, Issue 10, pp. 3–14. (in Russ.).
3. Babushkin I.A., Demin V.A. *Izvestia RAN, Mekhanika Zhidkosti i Gaza*, 2006, no. 3, pp. 3–10. (in Russ.).
4. Babushkin I.A., Demin V.A., Anferov D.V. Experimental and theoretical investigation of transitional convective flows in Hele–Shaw cell. *Proceeding of International Conference “Advanced Problems in Thermal Convection”*, Perm, Russia, 2004, pp. 173–178.
5. Babushkin I.A., Demin V.A., Glazkin I.V., Platonova A.N., Putin G.F. *Izvestia RAN, Mekhanika Zhidkosti i Gaza*, 2009, no. 5, pp. 3–14. (in Russ.).
6. Gershuni G.Z., Zhukhovitskiy E.M., Nepomnyashchiy A.A. *Ustoychivost' konvektivnykh techeniy* (The stability of convective flows). Moscow, Nauka Publ., 1989, 320 p. (in Russ.).
7. Samarskiy A.A. *Teoriya raznostnykh skhem* (Theory of difference schemes). Moscow, Nauka Publ., 1977, 656 p. (in Russ.).
8. Tarunin E.L. *Vychislitel'nyy eksperiment v zadachakh svobodnoy konveksii* (Computational experiment in free convection problems). Irkutsk, izd-vo Irkut. Un-ta Publ., 1990, 228 p. (in Russ.).

Received February 10, 2017

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВИДА «УПРУГОЙ» СОСТАВЛЯЮЩЕЙ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Ю.М. Ковалев

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: kovalevym@susu.ru

Представлены результаты обоснования выбора формы потенциала межмолекулярного взаимодействия, адекватно описывающего структуру взаимодействий в молекулярном кристалле нитросоединения. Показано, что энергия электростатического взаимодействия может составлять до 25 % от теплоты сублимации молекулярных кристаллов нитросоединений. Данное заключение позволило определить форму потенциала невалентных взаимодействий для построения двучленного уравнения состояния молекулярных кристаллов. Были получены замыкающие соотношения, определяющие параметры потенциала невалентных взаимодействий и упругую составляющую уравнений состояния.

Ключевые слова: уравнение состояния, молекулярный кристалл, энергия Гельмгольца, потенциал Леннарда-Джонса, потенциал Букингема, приближение Дебая, приближение Эйнштейна.

Введение

При построении математических моделей, описывающих быстропротекающие процессы в твердых взрывчатых веществах (ВВ), особую проблему представляют замыкающие соотношения уравнений математической физики – уравнения состояния. В настоящее время для определения параметров уравнений состояния при высоких давлениях и температурах широкое распространение получили двучленные уравнения состояния, в которых внутренняя энергия и давление представляются в виде суммы тепловой и холодной составляющих [1, 2]. Холодные составляющие внутренней энергии и давления не зависят от температуры и определяются только изменением расстояний между молекулами, в то время как тепловая составляющая описывает движение отдельных атомов и молекул в целом. Все твердые ВВ относятся к молекулярным кристаллам нитросоединений, молекулы которых имеют большое число степеней свободы. Межмолекулярное взаимодействие в молекулярных кристаллах органических соединений описывается силами Ван-дер-Ваальса. Построение уравнений состояния молекулярным кристаллов нитросоединений осложняется не только тем, что молекулы имеют большое число степеней свободы, но и тем, что в кристаллах могут образовываться водородные связи, которые уже не описываются только взаимодействием Ван-дер-Ваальса.

Анализ структур органических молекулярных кристаллов показал, что молекулы в органическом молекулярном кристалле образуют плотные упаковки, когда каждый атом молекулы стремится расположиться как можно ближе к атомам соседней молекулы [3]. Принцип плотной упаковки позволил А.И. Китайгородскому [3] сформулировать идею аддитивности энергии взаимодействия как для взаимодействия молекулы с молекулой, так и для взаимодействия атома с атомом в виде модели атом-атомных потенциалов: энергия взаимодействия молекул равна сумме энергий взаимодействий атомов, составляющих молекулы. Эти потенциалы универсальны и зависят только от сорта атома. Для схемы атом-атомных потенциалов могут быть приняты различные аналитические выражения типа (6-эксп-Букингема) или (6-12-Леннарда-Джонса), произвольные параметры которых должны определяться из экспериментальных значений теплоты сублимации простых органических молекулярных кристаллов. В соответствии с моделью атом-атомных потенциалов энергия решетки молекулярного кристалла представляется суммой электростатических и Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий в виде

$$U = E^{BB} + E^{\text{ЭЛ}} = \sum_{i,j} \left\{ \left[A_{i,j} \exp\left(b_{i,j} \left(1 - r_{i,j}/r_{i,j}^0\right)\right) \right] - C_{i,j} \left(\frac{r_{i,j}^0}{r_{i,j}}\right)^6 \right\} + E^{\text{ЭЛ}},$$

где $A_{i,j}$, $b_{i,j}$, $r_{i,j}^0$, $C_{i,j}$ – параметры потенциала Букингема для атомов i и j ; $r_{i,j}$ – расстояние между атомами i и j ; U – энергия решетки молекулярного кристалла; E^{BB} – энергия невалентных Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий; $E^{эл}$ – электростатическая энергия. Энергия электростатического взаимодействия определяется наличием остаточных электрических зарядов на атомах, входящих в состав молекул.

Несмотря на широкое применение двучленных уравнений состояния, остается еще много вопросов, связанных как с формой, так и с содержанием тепловой и холодной составляющих уравнений состояния. Поэтому цели настоящего исследования можно сформулировать следующим образом:

1. Определение вклада энергии электростатических взаимодействий в энергию решетки молекулярного кристалла нитросоединения;
2. Выбор потенциала межмолекулярного взаимодействия, адекватно описывающего структуру взаимодействий в молекулярном кристалле нитросоединения;
3. Обоснование выбора формы потенциала межмолекулярного взаимодействия, замыкающей на известные экспериментальные данные.

Оценка вклада электростатических взаимодействий в энергию решетки молекулярного кристалла

Модель атом-атомных потенциалов успешно применялась А.И. Китайгородским с сотрудниками для исследования свойств органических молекулярных кристаллов. Было показано, что энергия электростатических взаимодействий пренебрежимо мала по сравнению с теплотой сублимации (энергией решетки) для таких веществ, как углеводороды даже в случае молекул с большими дипольными моментами и ее можно не включать в схему атом – атомных потенциалов при проведении расчетов энергии решетки [3].

Последнее утверждение не является очевидным особенно для молекулярных кристаллов нитросоединений. Во-первых, заряды на атомах молекул нитросоединений на порядок больше зарядов на атомах обычных органических соединений, во-вторых, кристаллы нитросоединений содержат сильные водородные связи. Поэтому вопрос выбора модели атом-атомных потенциалов может быть решен только с помощью прямых расчетов энергии решетки молекулярных кристаллов нитросоединений, включающей в себя энергию Ван-дер-Ваальса и энергию электростатических взаимодействий.

Аналогично работе [4] проведем оценку вклада энергии электростатических взаимодействий в энергию решетки ряда молекулярных кристаллов нитросоединений. В качестве объектов исследования были выбраны молекулярные кристаллы нитробензола, *p*-динитробензола, *m*-динитробензола, *p*-нитротолуола, гексогена, *p*-нитроанилина, 2,4,6-тринитроанилина, 1,3,5-триамино-2,4,6-тринитробензола. Данный набор молекулярных кристаллов нитросоединений был выбран не случайно: в литературе для них имеются экспериментальные данные по теплоте сублимации и данные рентгеноструктурного анализа [4]. Для увеличения достоверности вычисления энергии электростатического взаимодействия заряды на атомах молекул нитросоединений рассчитывались в конформациях (геометрии), выбранных на основе данных рентгеноструктурного анализа, то есть соответствующих конформации молекул в кристалле. Эффективные заряды на атомах, воспроизводящие электростатический потенциал в окрестности молекулы и входящие в состав молекул перечисленных выше нитросоединений, вычислены в приближении Хартри–Фока более современными квантово-химическими методами [5], нежели это было сделано ранее в работе [4]. При вычислении энергии электростатических взаимодействий были использованы разные модификации метода Эвальда [6, 7].

Потенциалы невалентных взаимодействий $E_{i,k}^{B-B}$, определяющие взаимодействие Ван-дер-Ваальса, описывались универсальной кривой для каждого сорта атомов i и k в форме потенциала (6-хр–Букингема) [3, 4, 8].

Результаты расчетов энергии решетки молекулярных кристаллов нитросоединений и энергии электростатических взаимодействий приведены в таблице. Анализ приведенных результатов расчетов показывает, что вклад энергии электростатических взаимодействий в энергию решетки (те-

плоту сублимации) молекулярных кристаллов нитросоединений является значительным, в отличие от чисто органических молекулярных кристаллов, и может достигать 20–25 % энергии решетки. Поэтому при расчетах термодинамических характеристик молекулярных кристаллов нитросоединений, необходимых для построения уравнений состояния, должна быть использована полная схема атом-атомных потенциалов [3], то есть обязательно должна включаться в расчет энергия электростатических взаимодействий.

Сравнение экспериментальных и вычисленных энергий решетки

Соединение	$H_{\text{субл}}^{\text{эксп}}$ ($T = 298 \text{ K}$)	$H_{\text{субл}}^{\text{эксп}}$ ($T = 0 \text{ K}$)	$H_{\text{субл}}^{\text{выч}}$ ($T = 0 \text{ K}$)	$E^{\text{ЭЛ}}$
	Ккал /моль			
Нитробензол	13,98	15,14	15,30	2,7
т-динитробензол	19,40	20,57	20,60	6,5
р-динитробензол	21,20	22,37	22,50	5,9
р-нитротолуол	18,90	20,07	20,30	4,5
Гексоген	31,11	32,34	31,29	7,6
р - нитроанилин	24,10	25,20	25,30	6,9
Тринитроанилин	27,71	28,80	28,20	7,5
1,3,5- триамино- 2,4,6-тринитробензол	40,21	41,30	40,20	8,4

Определение формы упругой составляющей уравнений состояния молекулярных кристаллов

Вычисление упругих (невалентных межмолекулярных) составляющих внутренней энергии с учетом строения кристаллической решетки, проведенное в ряде работ [3, 4], показывает, что подобная детализация расчетов приводит к огромным затратам машинного времени, а аппроксимация энергии невалентных межмолекулярных взаимодействий U_V набором потенциалов в модели А.И. Китайгородского приводит к появлению большого количества констант, которые не всегда удается адекватно определить из имеющихся экспериментальных данных.

Следовательно, целесообразно подобрать некоторый эффективный потенциал упругого взаимодействия, который бы учитывал и особенности, полученные в результате детальных расчетов энергии упругих взаимодействий молекулярных кристаллов нитросоединений, и мог быть использован при решении задач математической физики.

Учитывая все выше сказанное, для энергии упругих взаимодействий U_V , в соответствии представлениями работы [5], должно быть принято следующее выражение:

$$U_V(x) = \frac{3A}{b\rho_0} \exp\left[b(1-x^{1/3})\right] - \frac{C}{2\rho_0} x^{-2} - \frac{3D}{\rho_0} x^{-1/3}, \quad (1)$$

где $x = \rho_0/\rho$ – безразмерный объем; A , b , C , D – постоянные подлежащие определению. Второй и третий члены выражения (1) описывают энергию притяжения. Сравнивая вычисленную энергию решетки кристалла с его теплотой сублимации, видим их различие как раз в энергии притяжения. Это может объясняться недостаточным учетом энергии водородных связей, существующих в молекулярных кристаллах нитросоединений. Поэтому целесообразно модифицировать потенциал упругих взаимодействий (1). В силу того, что выражения, описывающие энергию притяжения в потенциале упругих взаимодействий (1), имеют минимум для $x=1$, имеет смысл заменить сумму второго и третьего членов в выражении (1) одной функцией следующим образом:

$$U_V = \frac{3A}{b\rho_0} \exp\left[b\left(1-x^{1/3}\right)\right] - \frac{C}{n\rho_0} x^{-n}. \quad (2)$$

Потенциалы упругих взаимодействий (1) и (2) различаются тем, что показатель степени в выражении, описывающем энергию притяжения, не является фиксированным и подлежит определению из экспериментальных данных [9, 10]. Для определения констант, входящих в выражение (2), необходимо из эксперимента выбрать четыре параметра и замкнуть на них уравнения состояния при температуре $T = 0$.

Найдем связь между упругими составляющими внутренней энергии и давления. Известно, что термодинамические свойства вещества полностью определяются, если известен один из термодинамических потенциалов. Для молекулярных кристаллов удобно исходить из определения свободной энергии Гельмгольца $F(V, T)$, которая наиболее простым образом связана с моделью строения вещества:

$$F = U_V + E_0 + kT \sum_{\alpha} \ln\left(1 - \exp\left(-\frac{h\omega_{\alpha}}{kT}\right)\right), \quad E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} h\omega_{\alpha}. \quad (3)$$

Здесь U_V – энергия взаимодействия между атомами; V – удельный объем; T – температура тела; k – постоянная Планка; ω_{α} – частоты нормальных колебаний; E_0 – энергия нулевых колебаний. Если предположить, следуя работам [11, 12], возможность использования для низкочастотной составляющей свободной энергии подхода Дебая, а для высокочастотной – подхода Эйнштейна, то выражение (3) переписывается в виде

$$F = U_V + E_0 + 3MRT \left(\frac{T}{\theta_D}\right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \xi^2 \ln(1 - \exp(-\xi)) d\xi + (3N - M)RT \ln\left(1 - \exp\left(-\frac{\theta_E}{T}\right)\right), \quad (4)$$

где R – универсальная газовая постоянная; M – число низкочастотных колебаний; N – число атомов в молекуле; $3N - M$ – число высокочастотных колебаний; θ_D – характеристическая температура Дебая; θ_E – характеристическая температура Эйнштейна. Зная выражение для энергии Гельмгольца, легко определить вид уравнения состояния молекулярного кристалла и теплоемкости при постоянном объеме:

$$P = -\frac{\partial U_V}{\partial V} - \frac{dE_0}{dV} + \frac{MRT\gamma_D(V)D(x_D)}{V}, \quad \gamma_D(V) = -\frac{d(\ln \theta_D)}{d(\ln V)}; \quad (5)$$

$$E = F + TS = U_V + E_0 + MRTD(x_D) + (3N - M) \frac{RTx_E}{\exp(x_E) - 1}; \quad (6)$$

$$C_V = MR \left(4D(x_D) - \frac{3x_D}{\exp(x_D) - 1} \right) + (3N - M) R x_E^2 \frac{\exp(x_E)}{(\exp(x_E) - 1)^2}, \quad (7)$$

где $x_D = \theta_D/T$, $x_E = \theta_E/T$, $\gamma_D(V)$ – коэффициент Грюнайзена. В работах [11, 12] подробно описан алгоритм определения числа низкочастотных колебаний молекулярных кристаллов нитросоединений. Следуя определению коэффициента Грюнайзена [13], получим выражения для энергии нулевых колебаний E_0 и ее производной $\frac{dE_0}{dV}$:

$$E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} h\omega_{\alpha} = \frac{3N' - M'}{2} h\omega_{\alpha} + \frac{3M'}{2} \int_0^{\omega_p} \omega^2 h\omega d\omega = \frac{3N - M}{2} R\theta_E + \frac{3}{8} MR\theta_D(V) \quad (8)$$

$$\frac{dE_0}{dV} = -\frac{3}{8} \frac{MR\gamma_D(V)\theta_D(V)}{V}, \quad (9)$$

где N' – число атомов, M' – число низкочастотных колебаний в объеме V . Подставляя выражение для производной от энергии нулевых колебаний по объему (9) в выражение для давления, получаем уравнение состояния в виде

$$P = \frac{MRT\gamma_D(V)}{V} D(x_D) + P_0 + P_V, \quad P_0 = \frac{3}{8} MR\gamma_D(V)\theta_D/V; \quad P_V = -\frac{dU}{dV}. \quad (10)$$

В соответствии с соотношением (2) получим выражение упругого давления P_V , обусловленного энергией упругих взаимодействий $U_V(x)$, в следующем виде

$$P_V = Ax^{\frac{2}{3}} \exp \left[b \left(1 - x^{\frac{1}{3}} \right) \right] - Cx^{-(n+1)}. \quad (11)$$

Для получения более понятных с точки зрения физики выражений упругих составляющих внутренней энергии (2) и давления (11) сделаем ряд преобразований. По определению, изотермическая сжимаемость β_T связана с изотермической скоростью звука c_T следующим образом:

$$\frac{1}{\beta_T} = \frac{c_T^2}{V} = -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T. \quad (12)$$

Подставляя выражение (10) в правую часть равенства (12), в результате получим

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta_T} &= -V \frac{\partial}{\partial V} \left\{ MRT \gamma_D(V) \left[\frac{3}{8} x_D + D(x_D) \right] / V + P_V \right\}_T = \\ &= -V \left\{ -MRT \gamma_D(V) \left[\frac{3}{8} x_D + D(x_D) \right] / V^2 + MRT \gamma_D'(V) \left[\frac{3}{8} x_D + D(x_D) \right] / V + \right. \\ &+ MRT \gamma_D(V) \left[\frac{3}{8} x_D + D'(x_D) \right] \frac{\partial x_D}{\partial V} / V + \frac{\partial P_V}{\partial V} \left. \right\}_T = -V \left\{ -MRT \gamma_D(V) \left[\frac{3}{8} x_D + D(x_D) \right] / V^2 + \right. \\ &+ MRT \gamma_D'(V) \left[\frac{3}{8} x_D + D(x_D) \right] / V - MRT \gamma_D^2(V) \left[\frac{3}{8} x_D - \bar{C}_{V_D}(x_D) + D(x_D) \right] / V^2 + \frac{\partial P_V}{\partial V} \left. \right\} = \\ &= MRT \left[\gamma_D^2(V) + \gamma_D(V) \right] \left[\frac{3}{8} x_D + D(x_D) \right] / V - V \frac{\partial P_V}{\partial V} - MRT \gamma_D^2(V) \bar{C}_{V_D}(x_D) / V - \\ &\quad - MRT \gamma_D'(V) \left[\frac{3}{8} x_D + D(x_D) \right], \end{aligned}$$

где $\gamma_D'(V)$ – производная по V от коэффициента Грюнайзена,

$$\bar{C}_{V_D}(x_D) = \left(4D(x_D) - \frac{3x_D}{\exp(x_D) - 1} \right), \quad \frac{\partial x_D}{\partial V} = -\frac{x_D}{V} \gamma_D(V).$$

Следовательно, выражение для определения изотермической сжимаемости можно записать следующим образом

$$\begin{aligned} \frac{1}{\beta_T} &= MRT \left[\gamma_D^2(V) + \gamma_D(V) \right] \left[\frac{3}{8} x_D + D(x_D) \right] / V - \\ &- MRT \gamma_D^2(V) \bar{C}_{V_D}(x_D) / V - MRT \gamma_D'(V) \left[\frac{3}{8} x_D + D(x_D) \right] - V \frac{\partial P_V}{\partial V}, \end{aligned} \quad (13)$$

Проведем оценку членов, входящих в выражение для внутренней энергии (6), при стремлении температуры T к нулю. В этом случае речь идет о низкотемпературном пределе $T \rightarrow 0$, $x_D \rightarrow \infty$, $x_E \rightarrow \infty$. Низкотемпературный предел для функции Дебая $D(x_D)$ можно получить, если представить интеграл, входящий в ее выражение, в виде

$$\int_0^{x_D} \xi^3 \frac{d\xi}{\exp(\xi) - 1} = \int_0^\infty \xi^3 \frac{d\xi}{\exp(\xi) - 1} - \int_{x_D}^\infty \xi^3 \frac{d\xi}{\exp(\xi) - 1} = \frac{\pi^4}{15} - \int_{x_D}^\infty \xi^3 \frac{d\xi}{\exp(\xi) - 1}.$$

При низких температурах T параметр x_D велик, так что второй член в последнем равенстве можно оценить, отбросив 1 в знаменателе подынтегрального выражения

$$\int_{x_D}^\infty \xi^3 \frac{d\xi}{\exp(\xi) - 1} = \int_{x_D}^\infty \left[\xi^3 \exp(-\xi) \right] d\xi = \exp(-x_D) (x_D^3 + 3x_D^2 + 6x_D + 6).$$

Подставляя последнее выражение в функцию Дебая, получим

$$D(x_D) = \frac{3}{x^3} \left[\frac{\pi^4}{15} - \exp(-x_D) (x_D^3 + 3x_D^2 + 6x_D + 6) \right] \rightarrow 0.$$

Проведя предельный переход в последнем члене внутренней энергии, получим

$$\frac{\theta_E}{\exp(x_E) - 1} \xrightarrow{x_E \rightarrow \infty} \frac{\theta_E}{\exp(x_E)} \rightarrow 0.$$

Для внутренней энергии E предельный переход к низким температурам можно представить следующим образом

$$\begin{aligned} E &= U + E_0 + MRTD(x_D) + \frac{(3N - M)RTx_E}{\exp(x_E) - 1} = \\ &= U + E_0 + MRT \frac{3}{x_D^3} \left[\frac{\pi^4}{15} - \exp(-x_D) (x_D^3 + 3x_D^2 + 6x_D + 6) \right] + \\ &\quad + \frac{(3N - M)R\theta_E}{\exp(x_E)} \xrightarrow[x_E \rightarrow \infty]{x_D \rightarrow \infty} U(1) + E_0. \end{aligned} \quad (14)$$

Энергия нулевых колебаний E_0 определена выражением (8). Для определения изотермической сжимаемости при $T \rightarrow 0$, переходим в выражении (13) к пределу следующих функций:

$$\begin{aligned} \lim_{T \rightarrow 0} MR\rho T \left[\gamma_D^2(V) + \gamma_D(V) \right] \frac{3}{8} x_D &= \frac{3}{8} \theta_D MR\rho \left[\gamma_D^2(V) + \gamma_D(V) \right], \\ \lim_{T \rightarrow 0} MR\rho T \left[\gamma_D^2(V) + \gamma_D(V) \right] D(x_D) &= 0, \\ \lim_{T \rightarrow 0} MR\rho T \gamma_D^2(V) \bar{C}_{V_D}(x_D) &= 0, \\ \lim_{T \rightarrow 0} MRT \gamma_D'(V) \frac{3}{8} x_D &= \frac{3}{8} MR\theta_D \gamma_D'(V), \\ \lim_{T \rightarrow 0} MRT \gamma_D'(V) D(x_D) &= 0. \end{aligned}$$

Следовательно, при $T \rightarrow 0$ изотермическая сжимаемость определяется следующим выражением

$$\left(\frac{1}{\beta_T} \right)_{T \rightarrow 0} = \frac{3}{8} \theta_D MR\rho \left[\gamma_D^2(V) + \gamma_D(V) \right] - \frac{3}{8} MR\theta_D \gamma_D'(V) - V \frac{\partial P_Y}{\partial V} \quad (15)$$

Переходя в (15) от изотермической сжимаемости к изотермической скорости звука в соответствии с формулой (12), получим

$$\frac{c_0^2}{V} = \frac{3}{8} \theta_D MR\rho \left[\gamma_D^2(V) + \gamma_D(V) \right] - \frac{3}{8} MR\theta_D \gamma_D'(V) - V \frac{\partial P_Y}{\partial V}, \quad (16)$$

где c_0 – скорость звука при $T = 0$.

Полагая далее, что скорость звука при $T = 0$ определяется только упругими свойствами кристаллов, получим два уравнения:

$$\frac{c_0^2}{V_0} = -V_0 \frac{dP_Y}{dV}, \quad (17)$$

$$\gamma_D'(V_0) - \frac{1}{V_0} \gamma_D^2(V_0) - \frac{1}{V_0} \gamma_D(V_0) = 0.$$

Подставляя в правую часть равенства (17) выражение для холодного давления (11), получим при $x = 1$

$$\begin{aligned} -V_0 \frac{\partial P_Y}{\partial V} &= -\frac{\partial P_Y}{\partial x} = -\frac{2}{3} Ax^{-5/3} \exp[b(1-x^{1/3})] - \frac{1}{3} Abx^{-4/3} \exp[b(1-x^{1/3})] + \\ &\quad + C(n+1)x^{-(n+2)} = -\frac{2}{3} A - \frac{1}{3} Ab + C(n+1). \end{aligned} \quad (18)$$

В силу того, что для $x=1$ упругая составляющая внутренней энергии имеет минимум, то величина упругой составляющей давления равна нулю при $x=1$, и, как следует из выражения (11), коэффициенты A и C равны. Из равенств (17) и (18) можно определить выражение для коэффициента A через скорость звука c_0 для $x=1$ и $T=0$:

$$A = 3c_0^2 \rho_0 / (b - 3n - 1)$$

В этом случае выражения для упругой составляющей внутренней энергии и упругой составляющей давления принимают следующий вид:

$$U_y = \frac{3c_0^2}{bn(b-3n-1)} \left[3n \exp\left(b(1-x^{1/3})\right) - bx^{-n} \right] \quad (19)$$

$$P_y = \frac{3c_0^2 \rho_0}{bn(b-3n-1)} \left[x^{-2/3} \exp\left(b(1-x^{1/3})\right) - x^{-(n+1)} \right]. \quad (20)$$

Выводы

1. При проведении расчетов по определению энергии решетки молекулярных кристаллов нитросоединений необходимо применять полную схему атом-атомных потенциалов.

2. В работе получены выражения для упругой составляющей внутренней энергии (19) и упругой составляющей давления (20), которые наиболее простым образом определяются из известных экспериментальных данных.

3. Коэффициенты n и b в выражениях (19) и (20) определяются по экспериментальным ударным адиабатам молекулярных кристаллов.

Литература

1. Станюкович, К.П. Неустановившиеся движения сплошной среды / К.П. Станюкович. – М.: Наука, 1971. – 756 с.
2. Жарков, В.Н. Уравнения состояния при высоких температурах и давлениях / В.Н. Жарков, В.А. Калинин. – М.: Наука, 1968. – 311 с.
3. Китайгородский, А.И. Молекулярные кристаллы / А.И. Китайгородский. – М.: Наука, 1971. – 424 с.
4. Ковалев Ю.М. Энергия решетки кристаллов нитросоединений / Ю.М. Ковалев, В.А. Шляпочников // Известия Академии наук. Серия химическая. – 1979. – № 11. – С. 2601–2602.
5. Кларк, Т. Компьютерная химия / Т. Кларк. – М.: Мир, 1990. – 384 с.
6. Хариссон, У. Псевдопотенциалы в теории металлов / У. Хариссон. – М.: Мир, 1968. – 368 с.
7. Рейсленд, Дж. Физика фононов / Дж. Рейсленд. – М.: Мир, 1975. – 368 с.
8. Mayo, S.L. Dreiding: A general force field for molecular simulation / S.L. Mayo, B.D. Olafson, W.A. Goddard // J. Phys. Chem. – 1990. – Vol. 94, no. 26. – P. 8897–8909.
9. Dobrats, B.M. LLNL Explosives Handbook. Properties of Chemical Explosives and Explosive Simulants / B.M. Dobrats, P.C. Crawford. – Livermore, California: University of California, 1985.
10. Gibbs, T.R. Last explosive property data. Los Alamos series on dynamic material properties / T.R. Gibbs, A. Popolato. – Berkeley, Los Angeles, London: University of California Press, 1980.
11. Ковалев, Ю.М. Математическое моделирование тепловой составляющей уравнения состояния молекулярных кристаллов / Ю.М. Ковалев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия: Математическое моделирование и программирование. – 2013. – Т. 6, № 1. – С. 34–42.
12. Ковалев, Ю.М. Определение тепловой составляющей уравнения состояния молекулярных кристаллов / Ю.М. Ковалев, А.В. Белик // Челябинский физико-математический журнал. – 2013. – № 9 (300). – С. 5–10.
13. Жирифалько, Л. Статистическая физика твердого тела / Л. Жирифалько. – М.: Мир, 1975. – 382 с.

Поступила в редакцию 8 февраля 2017 г.

**DETERMINATION OF THE FORM OF "ELASTIC" COMPONENT
OF THE EQUATIONS OF STATE OF MOLECULAR CRYSTALS****Yu.M. Kovalev***South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E-mail: kovalevym@susu.ru*

The paper analyzes the diagram of atom-atom potentials as exemplified by calculation of energy of the molecular crystal lattice of nitro compounds. The performed in the paper calculations of energy of the crystal lattice of a number of nitro compounds have shown that the calculation data coincide with the experiment only when an electrostatic interaction between molecules is taken into account in the diagram of atom-atom potentials. The obtained results allowed us to create a potential for description of an elastic component of the internal energy and pressure in the two-term state equation of the molecular crystal. The accounting of electrostatic energy has led to the fact that in the Buckingham potential when describing the attraction energy an unknown parameter, i.e. a power coefficient for specific volume of the crystal, appears. On the whole, there are four parameters in the potential for description of the elastic component of the internal energy and pressure. These parameters are determined from experimental data. The analysis of experimental data on thermodynamic measurements has shown that the most adequate description of the elastic component of the internal energy and pressure in the two-term state equation of molecular crystals can be received only when the potential of intermolecular interactions closes on the isothermal compressibility or sound speed at the temperature of the crystal tending to zero. The consecutive passage to the limit in terms of the isothermal sound velocity for the crystal temperature, tending to zero, allowed us to get a rather simple potential for description of the elastic component of the internal energy and pressure, expression of which includes an explicitly isothermal sound speed. This approach enables us to reduce the number of unknown parameters to two, which are specified according to experimental shock adiabats.

Keywords: state equation; molecular crystal; Helmholtz energy; Lennard-Jones potential; Buckingham potential; Debye approximation; Einstein approximation.

References

1. Stanyukovich K.P. *Neustanovivshiesya dvizheniya sploshnoy sredy* (Unsteady motion of the continuum). Moscow, Nauka Publ., 1971, 756 p. (in Russ.).
2. Zharkov V.N., Kalinin V.A. *Uravneniya sostoyaniya pri vysokikh temperaturakh i davleniyakh* (State equations at high temperatures and pressure). Moscow, Nauka Publ., 1968, 311 p. (in Russ.).
3. Kitaygorodskiy A.I. *Molekulyarnye kristally* (Molecular crystals). Moscow, Nauka Publ., 1971, 424 p. (in Russ.).
4. Kovalev Yu.M., Shlyapochnikov V.A. Crystal lattice energy of nitro compounds. *Russian Chemical Bulletin*, 1979, Vol. 28, no. 11, pp. 2416–2417. DOI: 10.1007/BF00951729
5. Klark T. *Komp'yuternaya khimiya* (Computer chemistry). Moscow, Mir Publ., 1990, 384 p. (in Russ.).
6. Harrison W.A. *Pseudopotencial v teorii metallov* (Pseudopotentials in the theory of metals). Moscow, Mir Publ., 1968, 368 p. (in Russ.). [Harrison W.A. Pseudopotentials in the theory of metals. New York, Benjamin, 1966, 336 p.]
7. Reyslend, Dzh. *Fizika fononov* (Phonon physics). Moscow, Mir Publ., 1973, 368 p. (in Russ.). [Reissland J.A. The Physics of Phonons. London, New York: Wiley, 1973, 319 p.]
8. Mayo S.L., Olafson B.D., Goddard W.A. Dreiding: A general force field for molecular simulation. *J. Phys. Chem.*, 1990, Vol. 94, no.26, pp. 8897–8909. DOI: 10.1021/j100389a010
9. Dobratz B.M., Crawford P.C. *LLNL Explosives Handbook. Properties of Chemical Explosives and Explosive Simulants*. Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL-52997, 1985

10. Gibbs T.R., Popolato A. *Last explosive property data. Los Alamos series on dynamic material properties*. Berkeley, Los Angeles, London, University of California Press, 1980.

11. Kovalev Yu.M. Mathematical Modelling of the Thermal Component of the Equation of State of Molecular Crystals. *Bulletin of the South Ural State University. Series Mathematical Modelling, Programming & Computer Software*, 2013, Vol. 6, no. 1, pp. 34–42.

12. Kovalev Yu.M., Belik A.V. Determination of the thermal component of the equations of state of molecular crystals. *Chelyabinskiy fiziko-matematicheskiy zhurnal*, 2013, no. 9(300), pp. 5–10. (in Russ.).

13. Zhirifal'ko L. *Statisticheskaya fizika tverdogo tela* (Statistical solid state physics). Moscow, Mir Publ., 1975, 382 p. (in Russ.). [Girifalco L.A. *Statistical Physics of Materials*. John Wiley & Sons Inc, 1973, 362 p.]

Received February 8, 2017

AB INITIO STUDIES OF HYDROGEN PHYSISORPTION ON CLEAR AND LI-DOPED CARBON NANOTUBES

E.V. Anikina, V.P. Beskachko

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: anikate@inbox.ru

The hydrogen adsorption on internal and external surfaces of clear and Li-doped carbon nanotubes of different radii are investigated to assess the effects of concavity and doping on hydrogen uptake and binding energy. We make density functional calculations with the exchange-correlation functionals PBE and CA. Modeling of H₂ adsorption on clear carbon tubes shows that only in case of internal sorption on narrow (5,5) nanotube energy of adsorption fall within the desirable range of 300–400 meV per H₂ molecule. But in this case hydrogen uptake is too low and constitutes about 1,6 wt %. Doping with Li atom increases the adsorption energy of hydrogen molecule by 30–100 meV and in case of external sorption this energy enlarges several times. Nevertheless, the optimal range of binding energy can be achieved only in case of hydrogen adsorption inside quite narrow (5,5) and (7,7) Li-doped nanotubes.

Keywords: carbon nanotubes; lithium sorption; hydrogen adsorption; first-principles calculations; density functional theory.

Introduction

Hydrogen is considered as one of the most perspective energy carriers as it has a high energy content per mass, it can be generated from clean and green sources and its combustion produces only water as a byproduct [1]. However, for the utilization of H₂ in the national energy systems the difficulties concerning storage and transporting of hydrogen fuels should be overcome.

These problems can be solved by using compact and safe hydrogen storages. To create such storages it is necessary to find appropriate hydrogen sorbent. Carbon-based nanomaterials are thoroughly investigated candidates for H₂ storage due to their low density, porosity, high thermal and chemical stability, the simplicity and low cost of production [2]. Carbon nanotubes (CNTs) have not only properties mentioned above but also high mechanical strength, unique electrical and capillary features and therefore they attract a great attention of researches [3]. However, in spite of high surface area clear CNTs can adsorb only up to 1 wt % at room temperature [4] due to the weak bond between H₂ molecules and tube [5].

The possible solution of this problem is more active adsorption sites formation, for instance, by doping of carbon nanotubes with metal atoms [6, 7]. The perspective element for such use is lithium, because it has high nucleation barrier [8, 9]. Recently, Li-doped CNTs have been investigated theoretically and experimentally in search of effective material for Li-ion battery [10, 11]. Much less is known about the interaction of these structures with hydrogen. To fill this knowledge gap *ab initio* modeling based on density functional theory of H₂ physisorption on clear and Li-doped carbon nanotubes was made.

Models and simulation details

To assess the effects of concavity and doping on hydrogen uptake and binding energy the adsorption on internal and external surfaces of clear and Li-functionalized CNTs of different radii was investigated. Density functional calculations were carried out using SIESTA code [12], where periodically boundary conditions are implemented.

As there is a risk of accumulation of static electricity in hydrogen storages in the sorption/desorption processes, materials with high conductivity are required. Taking into account this fact, for modeling we chose armchair (*n,n*) carbon nanotubes that have metallic conductivity. These tubes also have small primitive unit cells that can decrease time costs of calculations.

In case of modeling Li-doped CNTs the distance between dopant atom and its image should be of the order of 10 Å, because at this extent valence orbitals of Li atoms do not overlap and the spurious interaction between lithium atom and its image can be excluded from consideration. This condition is fulfilled when the simulated fragment of nanotube has 4 or more CNT primitive unit cells.

The minimum CNT diameter D of approximately 7 Å was chosen not to have any steric or diffusion hindrances when placing lithium and molecular hydrogen into carbon nanotube [10]. In case of armchair tubes the value $D \approx 7$ Å corresponds with $n = 5$. Also, wider (7,7) and (9,9) carbon nanotubes were investigated. The parameters of studied CNT models (the diameter D and the number of carbon atoms in the simulated fragment of the structure N_{cell}) are indicated in Table 1.

We have performed density functional calculations with the local density approximation LDA (functional CA) and the generalized gradient approximation GGA (functional PBE). A basis set of atomic-like functions generated by Sankey scheme [12] was used. We simulated the rectangular supercells of dimensions about $100 \times 100 \times 10$ Å³. The tube axis was directed along the shortest axis of the supercell. Massively larger supercell crosswise sizes excluded the possibility of the interaction between the CNT models and its images. The equilibrium length of simulated CNT fragments was determined by its optimization and differed by 1–2 Å for various systems. The optimization was made as follows: we calculated the dependence of system total energy E_{tot} on the length l of the supercell shortest axis and the value corresponding to the minimal total energy was chosen as the equilibrium length of the model. E_{tot} for every l was calculated by the optimization of other geometrical degrees of freedom. The convergence criteria for the force acting on atom constituted 0,1 mRy/Bohr. This choice of optimization parameter allows us to obtain good accuracy, further decrease of the convergence criteria for force acting on atom leads to a surge of computational time.

With DZP basis for all elements (H, C, Li), Meshcutoff [12] of 360 Ry for the GGA calculations and 210 Ry for the LDA calculations and the [1,1,32] Monkhorst–Pack set of k -points calculated energies have a numerical precision of 5–10 meV.

Fig. 1 presents the results of total energy calculations made with two approximations (LDA and GGA) in case of system CNT(7,7)@Li where Li is on the outside tube surface. We plotted not the values of total energies but the difference between system energy and its equilibrium total energy. This was done because modeling with various approximations for electron exchange-correlation interaction results in significantly different absolute values of total energy. CNT(7,7)@Li minimal E_{tot} constitutes –18 201,212 eV and –17 414,032 eV, in case of using the GGA and the LDA respectively. Fig. 1 shows that equilibrium length of CNT(7,7) and Li on its external surface calculated with the GGA constitutes 9,86–9,87 Å. In case of the LDA this length is about 9,78–9,79 Å. So, for system CNT(7,7)@Li the difference between equilibrium lengths computed with the GGA and the LDA is approximately 0,8 %.

Table 1
The parameters of investigated CNT models

(n, m)	(5,5)	(7,7)	(9,9)
$D, \text{Å}$	6,78	9,49	12,20
N_{cell}	80	112	144

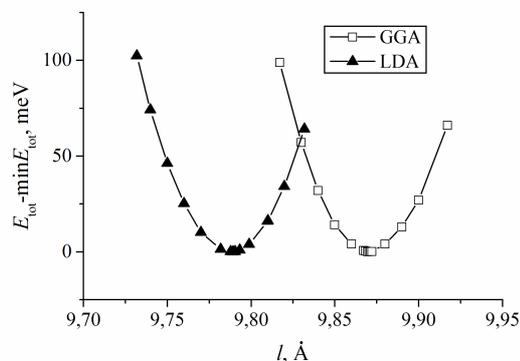


Fig. 1. The dependence of CNT(7,7)@Li total energy on the length of supercell shortest axis. Calculation was made with the local density and the generalized gradient approximations. Li atom is outside the tube

Lithium adsorption on carbon nanotubes

The Li-atom was placed on top of a carbon hexagon. The binding energies E_{bind} were obtained by subtracting total energies as follows:

$$E_{bind} = E_{CNT@Li} - E_{Li} - E_{CNT}, \quad (1)$$

where $E_{CNT@Li}$ is the total energy of complex CNT+Li, E_{Li} is the energy of Li-atom and E_{CNT} is the energy of clear carbon nanotube.

Computed results for parameters of lithium adsorption on the modeled carbon nanotubes (the binding energy E_{bind} , the charge Q_{tr} transferred from Li-atom to nanotube and the distance d between Li and CNT surface) are presented in Table 2. The value of Q_{tr} was calculated according to Mulliken.

Table 2

Parameters of lithium adsorption on external and internal CNT surfaces

Approximation Model	GGA			LDA		
	E_{bind} , eV	Q_{tr} , e	d , Å	E_{bind} , eV	Q_{tr} , e	d , Å
CNT(5,5)+Li inside	2,056	0,89	2,27	2,433	0,81	2,24
CNT(5,5)+Li outside	1,523	0,92	1,91	1,877	0,92	1,87
CNT(7,7)+Li inside	1,875	1,03	2,05	2,256	0,98	2,07
CNT(7,7)+Li outside	1,533	0,94	1,85	1,895	0,94	1,77
CNT(9,9)+Li inside	1,799	1,04	1,97	2,177	0,99	2,02
CNT(9,9)+Li outside	1,534	0,95	1,89	1,903	0,95	1,80

As one can see from Table 2, in all modeled cases the valence charge of Li almost completely transferred to carbon nanotube. The resulting electrostatic interaction between adatom and tube is the major contribution to the value of binding energy. The difference between adsorption parameters of internal and external sorption are great, especially if the CNT radius is small, like in case of CNT(5,5). This can be explained by the variations of overlaps of carbon and lithium orbitals when dopant atom is outside and inside the tube.

Hydrogen physisorption on pure carbon nanotubes

For modeling of adsorption of one hydrogen molecule initial configurations presented on Fig. 2 were chosen.

The binding energies E_{ads} of H_2 adsorption were obtained as follows:

$$E_{ads} = E_{CNT@H} - E_H - E_{CNT}, \quad (2)$$

where $E_{CNT@H}$ is the total energy of the complex CNT+ H_2 , E_H is the energy of hydrogen molecule, E_{CNT} is the total energy of clean carbon nanotube.

For every initial configuration of hydrogen molecule the optimization of geometry with the above-mentioned convergence criteria for force acting on atom was made. The structure length was fixed. E_{ads} and distance d between the nanotube surface and the mass center of H_2 molecule computed with approximations GGA and LDA are indicated in Table 3.

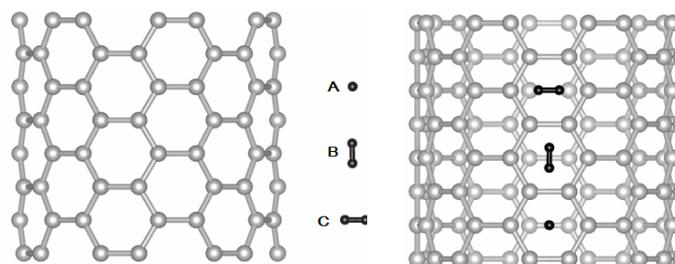


Fig. 2. Initial configurations of hydrogen molecules (A, B, C) related to the surface of CNT(7,7). In case of internal sorption the positions of configurations are similar

Table 3

Parameters of hydrogen physisorption on pure carbon nanotubes

	Approximation	Configura-tion	(5,5)		(7,7)		(9,9)	
			E_{ads} , meV	d , Å	E_{ads} , meV	d , Å	E_{ads} , meV	d , Å
External adsorption	GGA	A	56	2,96	51	2,94	61	2,98
		B	56	2,97	51	2,95	56	3,02
		C	39	3,18	51 (B)	2,98	41	3,21
	LDA	A	138	2,58	164	2,55	188	2,59
		B	156	2,55	166	2,54	196	2,58
		C	152 (B)	2,57	180 (B)	2,53	167	2,73
Internal ad-sorption	GGA	A	252	3,36	137	2,96	120	2,90
		B	283	3,34	136	2,93	120	2,90
		C	282 (B)	3,36	113	3,11	93	3,04
	LDA	A	472	3,31	315	2,73	288	2,70
		B	476	3,31	322	2,71	287	2,69
		C	465	3,33	306 (B)	2,70	284 (B)	2,66

Sometimes the relaxation of the geometry led to a change in the orientation of the hydrogen molecule. In these cases new configuration (A, B or C, see Fig. 2) is marked in brackets in the column with values of E_{ads} . As one can see from the Table 3, only molecules with the initial configuration C changed their direction. This configuration has smaller adsorption energy. The sign of CNT surface curvature significantly affects the hydrogen adsorption energy (the energy of internal sorption is 2–5 times higher than the energy of external sorption, and the bigger is the curvature the more considerable is the difference). Dependence of the binding energy on tube's radius is more discernible in case of internal adsorption (with the increasing of radius E_{ads} reduces). When hydrogen molecules are outside the nanotubes the CNT radius has a small impact on the adsorption energy (with the increasing of radius E_{ads} slightly rises or remains the same).

There is a tendency of the LDA to overestimate the energy of van der Waals interaction. In contrast, calculations with the GGA usually result in underrated energies of this weak interaction. So, the true value of E_{ads} is in the range of values obtained using these two approximations [13]. Finally, only in case of hydrogen sorption inside the CNT(5,5) energy of adsorption hit the range of 300–400 meV per molecule (see Table 3) that is necessary to have effective charging/recharging cycles in hydrogen storages [14].

To estimate the possible hydrogen uptake we considered the dependence of H₂ adsorption energy on number of hydrogen molecules in case of internal sorption on CNT(5,5). The adsorption energies of one H₂ molecule were calculated as follows:

$$E_{ads} = (E_{CNT@nH} - E_{nH} - E_{CNT})/n, \quad (3)$$

where n is a number of H₂ molecules in simulated complexes, other notations are similar to ones in the Formula (2).

When $n \geq 2$ there are several equilibrium configurations where hydrogen molecules get into different positions in relation to each other and the CNT surface. Near the configuration with the lowest energy usually there are some other configurations with the close energies. Table 4 presents the results of calculations of binding energies in case of $n = 2 \div 6$. For every n it indicates the range of E_{ads} of configurations that are close to the energetically most favorable one.

As one can see from Table 4, only in case of internal sorption of up to 4 hydrogen molecules on 4 primitive unit cells of CNT(5,5) energy of adsorption hit the desirable range. But in this case hydrogen uptake is too low and constitutes about 1,6 wt %. This fact confirms the inefficiency of clean carbon nanotubes as hydrogen storages under ambient temperature and pressure.

Table 4
Adsorption energy E_{ads} (meV) of H₂ molecules inside CNT(5,5)

Число молекул	Приближение	
	GGA	LDA
2	250-269	464-479
3	241-244	448-450
4	205-215	399-401
5	133-134	354
6	94	330

Hydrogen physisorption on Li-doped carbon nanotubes

For modeling of adsorption of one hydrogen molecule on complexes CNT+Li (H₂ and Li are at the same side of nanotube surface) initial configurations presented on Fig. 3 were chosen. The position A is near lithium and on top of a neighboring carbon hexagon. In the orientation A1 the molecule axis is parallel to the tube's surface and perpendicular to the tube's axis, in A2 it is parallel to both tube's surface and axis and in A3 it is perpendicular to the nanotube surface. The position B is on top of Li-atom. The site B1 is similar to A1, B2 is similar to A2. The position C is like A, but it is placed farther from lithium. The orientation C1 is similar to A1, C2 is similar to A3. In case of internal sorption notations are the same.

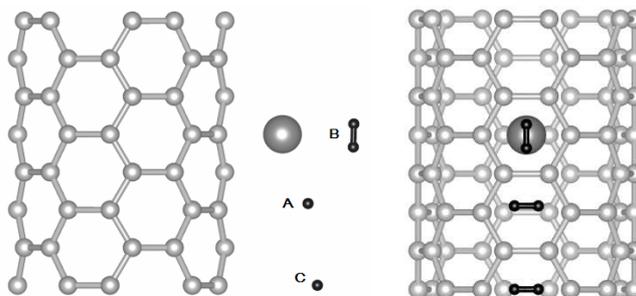


Fig. 3. Initial configurations of hydrogen molecules (A,B,C) related to the surface of CNT(5,5)@Li. In case of internal sorption the positions of configurations are similar

For every initial configuration of hydrogen molecule the optimization of geometry with the above-mentioned convergence criteria for force acting on atom (0,1 mRy/bohr) and the fixed structure length was made.

The adsorption energy of hydrogen E_{ads} was obtained by subtracting total energies as follows:

$$E_{ads} = E_{CNT@Li@H} - E_H - E_{CNT@Li}, \quad (4)$$

where $E_{CNT@Li@H}$ is the total energy of the system CNT+Li+H₂, E_H is the energy of hydrogen molecule and $E_{CNT@Li}$ is the total energy of the complex CNT+Li.

Also we calculated the distance between Li-atom and the mass center of H₂ molecule d_{H-Li} and the distance between this mass center and the CNT surface d_{H-CNT} . Results of modeling are presented in Table 5.

Table 5

Parameters of hydrogen physisorption on Li-doped carbon nanotubes

	Approximation	Configuration	(5,5)			(7,7)			(9,9)		
			E_{ads} , meV	d_{H-Li} , Å	d_{H-CNT} , Å	E_{ads} , meV	d_{H-Li} , Å	d_{H-CNT} , Å	E_{ads} , meV	d_{H-Li} , Å	d_{H-CNT} , Å
External sorption	GGA	A1	137	2,28	3,08	142	2,29	3,06	149	2,28	3,05
		A2	146 (A3)	2,25	3,24	151 (A3)	2,25	3,20	154 (A3)	2,24	3,21
		A3	146	2,25	3,23	150	2,23	3,20	155	2,23	3,23
		B1	147	2,23	4,06	146	2,22	4,07	142	2,23	4,10
		B2	147	2,21	4,05	148	2,22	4,06	141	2,23	4,10
		C1	53	5,06	2,96	60	5,05	2,95	59	5,04	2,96
		C2	48	5,11	3,15	51	5,10	3,14	53	5,09	3,17
	LDA	A1	249	2,30	2,56	258	2,28	2,54	258	2,29	2,54
		A2	252 (A3)	2,21	2,71	264 (A3)	2,23	2,59	265 (A3)	2,20	2,68
		A3	252	2,22	2,69	258	2,20	2,69	259	2,20	2,71
		B1	216	2,13	3,89	178	2,14	3,90	183	2,14	3,92
		B2	170	2,14	3,90	178	2,13	3,89	184	2,14	3,91
		C1	145	4,97	2,57	158	4,97	2,55	164	4,95	2,56
		C2	131	4,99	2,69	159 (C1)	4,96	2,56	150	4,98	2,69
Internal sorption	GGA	A1	274	2,27	3,47	200	2,26	3,05	193	2,27	2,98
		A2	274 (A1)	2,27	3,47	196 (A3)	2,25	3,23	194 (A3)	2,27	3,02
		A3	273	2,27	3,43	196	2,25	3,23	194	2,26	3,02
		B1	274 (A1)	2,27	3,47	182	2,22	4,28	172	2,21	4,18
		B2	272 (A1)	2,27	3,46	173	2,22	4,27	167	2,21	4,17
		C1	237	5,09	3,38	134	4,98	2,96	115	5,02	2,89
		C2	253	5,11	3,36	134 (C1)	4,98	2,96	101	5,05	3,03
	LDA	A1	510	2,26	3,13	365	2,25	2,69	340	2,25	2,65
		A2	510 (A1)	2,26	3,13	364 (A3)	2,23	2,70	334 (A3)	2,25	2,65
		A3	505	2,28	3,38	364	2,23	2,70	333	2,17	2,74
		B1	510 (A1)	2,26	3,13	254	2,12	4,18	212	2,11	4,10
		B2	473	2,05	2,61	243	2,13	4,18	207	2,11	4,10
		C1	475	5,03	3,35	292	4,94	2,69	261	4,94	2,65
		C2	457	5,05	3,38	259	4,95	2,78	225	2,96	2,75

Comparing Tables 3 and 5 one can see that doping with Li atom increases the adsorption energy of hydrogen molecules up to 30–100 meV. The lowest impact is in the case of internal adsorption (especially inside narrow CNTs). The binding energy between H₂ and CNT(5,5)@Li is about 10 % higher in comparison with pure CNT(5,5). In case of wider CNT(9,9) this value achieves approximately

30 %. The binding energy of hydrogen to external nanotube's surface increases by 2–3 times but remains insufficient for practical uses. Dependence of adsorption energy on tube's radius is more discernible in case of internal adsorption: when passing from a narrow (5,5) tube to (9,9) a nanotube the energy drops by a factor of 1,5. The binding energy of hydrogen to external CNT's surface becomes slightly greater with tube's radius increasing.

To summarize, doping of CNTs with lithium can increase the adsorption energy of hydrogen molecules by several times in comparison with the clean CNTs. Nevertheless, the optimal range of binding energy 300–400 meV per H₂ molecule can be achieved only in case of hydrogen adsorption inside quite narrow (5,5) and (7,7) Li-doped nanotubes.

Conclusions

Modeling of the selected systems CNT+H₂ and CNT+Li+H₂ showed that pure carbon nanotubes can adsorb only small amount of molecular hydrogen (up to 1,6 wt % in case of internal sorption on (5,5) nanotube) due to the weak bond between H₂ molecules and tube. Doping with Li atom increases the adsorption energy of hydrogen molecules up to 30–100 meV because of the contribution of electrostatic interaction (the valence charge of Li almost completely transferred to carbon nanotube).

The curvature of nanotube surface significantly influences the energy of the internal sorption of hydrogen while the effect on the external sorption is of minor importance both in case of clean and doped nanotubes. When hydrogen molecules are inside the tubes the binding energies are 1,5–3,5 times bigger than when these molecules are outside. With the increasing of the CNT radius this difference reduces.

On the whole, despite the fact that in case of external sorption doping with Li-atom can increase the adsorption energy of hydrogen molecules by several times in comparison with the clean CNTs, only inside quite narrow (5,5) and (7,7) Li-doped nanotubes the values of binding energies can hit the desirable range. However, small radius of these tubes can lead to low hydrogen capacities because of the problems with the diffusion accessibility of the inner surface of the tubes.

The reported study utilized the supercomputer resources of South Ural State University [15].

References

1. Dutta S. A review on production, storage of hydrogen and its utilization as an energy resource. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 2014, Vol. 20, no. 4, pp. 1148–1156. DOI: 10.1016/j.jiec.2013.07.037
2. Sakintuna B., Yürüm Y. Templated porous carbons: a review article. *Industrial & engineering chemistry research*, 2005, Vol. 44, no. 9, pp. 2893–2902. DOI: 10.1021/ie049080w
3. Oriňáková R, Oriňák A. Recent applications of carbon nanotubes in hydrogen production and storage. *Fuel*, 2011, Vol. 90, no. 11, pp. 3123–3140. DOI: 10.1016/j.fuel.2011.06.051
4. Kajiura H., Tsutsui S., Kadono K., Kakuta M., Ata M., Murakami Y. Hydrogen storage capacity of commercially available carbon materials at room temperature. *Applied physics letters*, 2003, Vol. 82, no. 7, pp. 1105–1107. DOI: 10.1063/1.1555262
5. Ansón A., Callejas M.A., Benito A.M., Maser W.K., Izquierdo M.T., Rubio B., Jagiello J., Thommes M., Parra J.B., Martínez M.T. Hydrogen adsorption studies on single wall carbon nanotubes. *Carbon*, 2004, Vol. 42, no. 7, pp. 1243–1248. DOI: 10.1016/j.carbon.2004.01.038
6. Hoang T.K.A., Antonelli D.M. Exploiting the Kubas interaction in the design of hydrogen storage materials. *Advanced Materials*, 2009, Vol. 21, no. 18, pp. 1787–1800. DOI: 10.1002/adma.200802832
7. Pumera M. Graphene-based nanomaterials for energy storage. *Energy & Environmental Science*, 2011, Vol. 4, no. 3, pp. 668–674. DOI: 10.1039/C0EE00295J
8. Sun Q., Jena P., Wang Q., Marquez M. First-principles study of hydrogen storage on Li₁₂C₆₀. *Journal of the American Chemical Society*, 2006, Vol. 128, no. 30, pp. 9741–9745. DOI: 10.1021/ja058330c
9. Liu M., Kutana A., Liu Y., Yakobson B.I. First-principles studies of Li nucleation on graphene. *The journal of physical chemistry letters*, 2014, Vol. 5, no. 7, pp. 1225–1229. DOI: 10.1021/jz500199d
10. Sozykin S.A., Beskachko V.P. Structure of endohedral complexes of carbon nanotubes encapsulated with lithium and sodium. *Molecular Physics*, 2013, Vol. 111, no. 7, pp. 930–938. DOI: 10.1080/00268976.2012.760049

11. Sozykin S.A., Beskachko V.P., Vyatkin G.P. The structure of carbon nanotube exohedral complexes with lithium in a wide range of concentrations. *Materials Science Forum*, 2016, Vol. 870, pp. 135–140. DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.870.135

12. Soler J.M., Artacho E., Gale J.D., García A., Junquera J. The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2002, Vol. 14, no. 11, pp. 2745. DOI: 10.1088/0953-8984/14/11/302

13. Klimeš J., Michaelides A. Perspective: Advances and challenges in treating van der Waals dispersion forces in density functional theory. *The Journal of chemical physics*, 2012, Vol. 137, no. 12, pp. 120901. DOI: 10.1063/1.4754130

14. Li J., Furuta T., Goto H., Ohashi T., Fujiwara Y., Yip S. Theoretical evaluation of hydrogen storage capacity in pure carbon nanostructures. *The Journal of chemical physics*, 2003, Vol. 119, no. 4, pp. 2376–2385. DOI: 10.1063/1.1582831

15. Kostenetskiy P.S., Safonov A.Y. SUSU Supercomputer Resources. *Proceedings of the 10th Annual International Scientific Conference on Parallel Computing Technologies (PCT 2016)*. Arkhangelsk, Russia, March, 2016, Vol. 1576, pp. 561–573. (in Russ.).

Received March 27, 2017

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2017, vol. 9, no. 2, pp. 64–71*

УДК 539.2

DOI: 10.14529/mmph170208

ФИЗИЧЕСКАЯ АДСОРБЦИЯ ВОДОРОДА НА ЧИСТЫХ И ЛЕГИРОВАННЫХ ЛИТИЕМ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБКАХ: АБ ИНИТІО МОДЕЛИРОВАНИЕ

Е.В. Аникина, В.П. Бескачко

*Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация
E-mail: anikate@inbox.ru*

Для оценки влияния на адсорбцию водорода таких факторов, как кривизна поверхности и присутствие атомов примеси, в данной работе рассматривалась адсорбция молекул H_2 на внутренней и внешней поверхностях чистых и легированных литием углеродных нанотрубок разного радиуса. Численные эксперименты проводились в пакете SIESTA в двух приближениях для обменно-корреляционного потенциала: GGA и LDA. Моделирование адсорбции водорода на поверхности чистых нанотрубок показало, что только при внутренней адсорбции водорода в УНТ (5,5) энергии связи попадают в диапазон 300–400 мэВ/(молекулу H_2), обеспечивающий эффективность циклов сорбции/десорбции газа, но это соответствует слишком малым массовым долям H_2 – до 1,6 %. Легирование литием позволяет увеличить энергию адсорбции молекулы водорода на 30–100 мэВ, при этом энергия внешней адсорбции возрастает в 2–3 раза. Однако требуемый интервал энергий может быть достигнут только при внутренней адсорбции на достаточно тонких трубках (5,5) и (7,7).

Ключевые слова: углеродные нанотрубки; сорбция лития; адсорбция водорода; расчеты из первых принципов; теория функционала плотности.

Литература

1. Dutta, S. A review on production, storage of hydrogen and its utilization as an energy resource / S. Dutta // *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*. – 2014. – Т. 20, № 4. – С. 1148–1156.

2. Sakintuna, B. Templated porous carbons: a review article / B. Sakintuna, Y. Yürüm // *Industrial & engineering chemistry research*. – 2005. – Т. 44, № 9. – С. 2893–2902.

3. Oriňáková, R. Recent applications of carbon nanotubes in hydrogen production and storage / R. Oriňáková, A. Oriňák // *Fuel*. – 2011. – Т. 90, № 11. – С. 3123–3140.

4. Kajiura, H. Hydrogen storage capacity of commercially available carbon materials at room temperature / H. Kajiura, S. Tsutsui, K. Kadono *et al.* // Applied physics letters. – 2003. – Т. 82, № 7. – С. 1105–1107.
5. Hydrogen adsorption studies on single wall carbon nanotubes / A. Anson, M.A. Callejas, A.M. Benito *et al.* // Carbon. – 2004. – Т. 42, № 7. – С. 1243–1248.
6. Hoang, T.K.A. Exploiting the Kubas interaction in the design of hydrogen storage materials / T.K.A. Hoang, D.M. Antonelli // Advanced Materials. – 2009. – Т. 21, № 18. – С. 1787–1800.
7. Pumera, M. Graphene-based nanomaterials for energy storage / M. Pumera // Energy & Environmental Science. – 2011. – Т. 4, № 3. – С. 668–674.
8. First-principles study of hydrogen storage on $\text{Li}_{12}\text{C}_{60}$ / Q. Sun, P. Jena, Q. Wang, M. Marquez // Journal of the American Chemical Society. – 2006. – Т. 128, № 30. – С. 9741–9745.
9. First-principles studies of Li nucleation on graphene / M. Liu, A. Kutana, Y. Liu, B.I. Yakobson // The journal of physical chemistry letters. – 2014. – Т. 5, № 7. – С. 1225–1229.
10. Sozykin, S.A. Structure of endohedral complexes of carbon nanotubes encapsulated with lithium and sodium / S.A. Sozykin, V.P. Beskachko // Molecular Physics. – 2013. – Т. 111, № 7. – С. 930–938.
11. Sozykin, S.A. The structure of carbon nanotube exohedral complexes with lithium in a wide range of concentrations / S.A. Sozykin, V.P. Beskachko, G.P. Vyatkin // Materials Science Forum. – 2016. – Vol. 870. – P. 135–140.
12. The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation / J.M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale *et al.* // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2002. – Vol. 14, no. 11. – P. 2745.
13. Klimeš, J. Perspective: Advances and challenges in treating van der Waals dispersion forces in density functional theory / J. Klimeš, A. Michaelides // The Journal of chemical physics. – 2012. – Vol. 137, no. 12. – P. 120901.
14. Theoretical evaluation of hydrogen storage capacity in pure carbon nanostructures / J. Li, T. Furuta, H. Goto, T. Ohashi *et al.* // The Journal of chemical physics. – 2003. – Vol. 119, no. 4. – P. 2376–2385.
15. Kostenetskiy, P.S. SUSU Supercomputer Resources / P.S. Kostenetskiy, A.Y. Safonov // Proceedings of the 10th Annual International Scientific Conference on Parallel Computing Technologies (PCT 2016). – 2016. – Vol. 1576. – P. 561–573.

Поступила в редакцию 27 марта 2017 г.

ОЦЕНКА ВЕРОЯТНОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ ДОЛГОЖИВУЩЕГО ДИМЕРА МЕДИ В ДВУХЧАСТИЧНОМ СТОЛКНОВЕНИИ НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Г.П. Санников, А.Е. Коренченко

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация
E-mail: sannikovgrigi@gmail.com

Знание механизмов зарождения, роста и дальнейшего развития наночастиц важно для оптимизации методов их производства. Большинство методов производства наночастиц подразумевает самосборку из жидкой или газообразной фазы. Начальный этап гомогенной нуклеации из атомарного пара в значительной степени определяет конечное распределение частиц по размерам, что обуславливает актуальность его исследования. В данной работе проведен статистический анализ результатов молекулярно-динамического моделирования нуклеации паров металла (Cu) в атмосфере инертного газа (Ar). Рассмотрены особенности начальной стадии нуклеации с целью оценки вероятности роста двухатомных молекул (Cu_2) в пересыщенной неравновесной среде. Показано, что в результате столкновения двух атомов металла может образоваться неустойчивый димер, время существования которого сравнимо со временем между соударениями атомов металла. По результатам статистического анализа оценена дифференциальная вероятность образования долгоживущего неустойчивого димера в двухчастичных взаимодействиях в зависимости от значения энергии сталкивающихся частиц в системе их центра масс. Интегрирование дифференциальной вероятности по всем энергиям с учетом теоретического распределения атомов меди по энергии при заданной температуре позволило получить интегральную оценку вероятности образования долгоживущего димера в столкновении Cu-Cu. Обнаружилось, что при увеличении температуры в диапазоне 300–1500 К вероятность образования уменьшается от 0,86 % до 0,16 %.

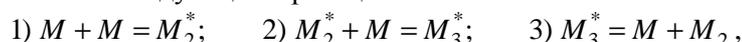
Ключевые слова: металлические наночастицы; газофазный синтез; гомогенная нуклеация.

Введение

Поиск новых материалов и методов их производства является актуальной задачей современного материаловедения. Особое внимание привлекают нанопорошки и материалы на их основе. В последнее время стали активно изучаться свойства металлических нанопорошков, которые можно использовать как электропроводящую пасту, катализатор, магнитную жидкость и даже как биодобавку [1–5].

Знание механизмов зарождения, роста и дальнейшего развития наночастиц важно для оптимизации методов производства наночастиц. Известно несколько способов изготовления металлических наночастиц, но более распространена конденсация наночастиц из газа соответствующего металла. При этом в рабочей камере формируется среда, состоящая из пересыщенного пара металла и инертного газа, и создаются условия для протекания гомогенной нуклеации. Изучение начального этапа гомогенной нуклеации из атомарного пара представляет значительный интерес, так как эта стадия, особенности протекания которой определяют дальнейший рост кластеров и, таким образом, конечное распределение по размерам.

В работах, посвященных начальной стадии гомогенной нуклеации [6–8], часто указывается, что двухатомные молекулы металла M_2 (димеры) образуются в результате трехчастичных взаимодействий в соответствии со следующими реакциями:



где звездочкой отмечены частицы в нестабильных короткоживущих состояниях (время жизни $\sim 10^{-12}$ с). В результате столкновения $M + M$ не может образоваться стабильная молекула (димер), так как ее энергия в системе центра масс будет положительной. Однако время существова-

ния димера может быть достаточным ($\sim 10^{-9}$ с), чтобы он успел столкнуться с другими атомами или кластерами металла. Такой нестабильный долгоживущий димер может продолжать расти. Статистический анализ появления долгоживущих димеров в двухчастичных столкновениях ранее не проводился.

Целью данной статьи является исследование образования долгоживущего димера при двухчастичном взаимодействии и выявление зависимости вероятности этого события от температуры при помощи статистического анализа результатов молекулярно-динамических (МД) расчетов конденсации пара меди в среде аргона.

1. Моделирование формирования наночастиц

Исследование формирования наночастиц из пересыщенных паров металла проводилось МД методом, реализованном в пакете для многопроцессорных вычислений LAMMPS [9]. Система состояла из 5 000 атомов буферного газа (Ar) и 5 000 атомов металла (Cu). Взаимодействие атомов меди описывалось потенциалом погруженного атома (ЕАМ потенциалом) [10]. Этот потенциал зависит от положения других атомов и плотности электронного облака. ЕАМ потенциал достаточно хорошо описывает конденсированную фазу меди и успешно применялся для исследования конденсации пара металла [11, 12]. Взаимодействия Ar-Ar и Cu-Ar, так же, как и в работе [12], описывались потенциалом Леннарда-Джонса с параметрами $e = 0,0123$ эВ, $a = 3,76$ Å. Радиус отсечки потенциалов составлял 10 Å.

Атомы помещались в кубическую ячейку с периодическими граничными условиями. Начальное распределение атомов по пространству было равномерным, а начальное распределение по скоростям соответствовало распределению Максвелла при заданной температуре.

Термостатирование системы происходило только для атомов инертного газа для большего соответствия реальной системе. Временной шаг был выбран равным 3 фс. Выбор такого малого шага гарантировал, что на каждом шаге молекулярной динамики в рассмотренной атомной системе происходило либо объединение двух частиц, либо распад кластера на две части. Эволюция атомной системы рассматривалась в течение времен порядка 500 нс.

Для получения статистического материала, достаточного для обобщений, расчеты проводились при различных конфигурациях атомов и внешних условиях. Температура аргона выбиралась в интервале $300 \text{ К} \leq T_{\text{Ar}} \leq 1500 \text{ К}$, размеры ячейки подбирались так, чтобы плотность пара меди находилась в диапазоне $0,1 \text{ кг/м}^3 \leq \rho_{\text{Cu}} \leq 0,3 \text{ кг/м}^3$. Парциальное давление металлического пара при этом составляло $3 \cdot 10^3 \text{ Па} < p < 5 \cdot 10^4 \text{ Па}$, такое давление вполне реалистично и наблюдается в установках для газофазного синтеза с испарителем [13, 14].

Анализировались следующие величины и соотношения между ними: время жизни кластера t , значение энергии кластера в системе центра масс в расчете на один атом ε , значение прицельного параметра b (только для димеров, образованных в двухчастичном столкновении). Таким образом, в любой момент времени существования атомной системы было известно распределение кластеров по количеству атомов n , по энергии ε_n , по времени жизни t_n , и по прицельному параметру b .

2. Интегральная оценка вероятности образования долгоживущего димера при столкновении двух атомов меди

Расчеты, проведенные при использовании потенциала Леннарда-Джонса и ЕАМ потенциала, как и предполагалось, показали, что в результате двухчастичного столкновения может образоваться нестабильный долгоживущий димер, длительность жизни которого (~ 1 нс) во много раз превосходит часто наблюдаемую длительность взаимодействия частиц (~ 1 пс). Далее будем называть нестабильный долгоживущий димер, просто долгоживущим димером. Среднее время между столкновениями атомов в моделируемой системе также порядка 1 нс, поэтому велика вероятность того, что долгоживущий димер столкнется с третьим атомом и станет основой для зарождающейся частицы.

Зависимость вероятности образования долгоживущего димера при столкновении двух атомов меди от температуры можно определять как отношение числа взаимодействий, приведших к образованию долгоживущего димера, к общему числу столкновений двух атомов меди $P^+(T) = N^+ / N$ при различных значениях температуры системы.

В этом случае для каждой температуры необходимо проводить свою серию расчетов и каждый раз отслеживать эффективную температуру свободных атомов меди в системе, отличающуюся от температуры термостата инертного газа.

Зависимость вероятности образования долгоживущего димера при столкновении двух атомов меди от температуры может быть получена более рациональным способом. Если на основе МД моделирования получить зависимость дифференциальной вероятности этого события от энергии столкновения ε (энергия сталкивающихся частиц в системе их центра масс) $p^+(\varepsilon)$ и проинтегрировать ее по всем энергиям с учетом теоретического распределения атомов меди по энергии при заданной температуре, то можно получить интегральную оценку вероятности образования долгоживущего димера:

$$P^+(T) = \int_0^\infty p^+(\varepsilon) \cdot f_T(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (1)$$

Эта оценка корректна при условии, что дифференциальная вероятность $p^+(\varepsilon)$ не зависит от внешних условий.

Результат взаимодействия двух частиц определяется энергией столкновения ε и прицельным параметром b . Эти величины независимы, поэтому функции от этих величин также можно рассматривать независимо.

Величина $p^+(\varepsilon)$ определялась следующим образом. Система рассматривалась в течение времени $\Delta t = 100$ нс, отслеживалось число всех образовавшихся димеров $N_{\varepsilon; \varepsilon + \Delta\varepsilon}$ с энергиями от ε до $\varepsilon + \Delta\varepsilon$ и число долгоживущих димеров $N_{\varepsilon; \varepsilon + \Delta\varepsilon}^+$. Вероятность образования долгоживущего димера $p^+(\varepsilon, \Delta\varepsilon)$ в интервале энергий от ε до $\varepsilon + \Delta\varepsilon$ определялась отношением:

$$p^+(\varepsilon, \Delta\varepsilon) = N_{\varepsilon; \varepsilon + \Delta\varepsilon}^+ / N_{\varepsilon; \varepsilon + \Delta\varepsilon}. \quad (2)$$

Расчеты проводились в области энергий $0 - 0,5$ эВ, интервал $\Delta\varepsilon$ выбирался в диапазоне $10^{-3} - 10^{-2}$ эВ. Рассчитанную таким образом зависимость $p^+(\varepsilon, \Delta\varepsilon)$ можно было использовать в выражении (1), преобразованном в сумму:

$$P^+(T) = \sum_{\varepsilon, \Delta\varepsilon} p^+(\varepsilon, \Delta\varepsilon) \cdot f_T(\varepsilon) \Delta\varepsilon. \quad (3)$$

Функцию плотности вероятности энергии в системе центра масс $f_T(\varepsilon)$ можно найти, используя распределение проекций скорости атома меди в системе центра масс двух частиц $v'_x = (v_{x1} - v_{x2})/2$. Распределения проекций скоростей – это четные функции, поэтому распределение $(v_{x1} - v_{x2})/2$ совпадает с распределением величины $(v_{x1} + v_{x2})/2$, являющейся проекцией скорости центра масс димера с массой $2m$, и имеет следующий вид [15]:

$$f(v'_{x,y,z}) = \sqrt{\frac{2m}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{2mv_{x,y,z}^2}{2kT}\right). \quad (4)$$

Функция распределения энергии ε атома в системе центра масс с учетом выражения (4) имеет следующий вид:

$$f_T(\varepsilon) = 2\pi(\pi kT/2)^{-3/2} \sqrt{\varepsilon} \exp(-2\varepsilon/kT) \quad (5)$$

Таким образом, МД моделирование позволяет получить интегральную оценку вероятности образования долгоживущего димера в двухчастичном столкновении атомов меди.

3. Полученные вероятности образования долгоживущих димеров

Для получения зависимости вероятности образования долгоживущего димера при столкновении частиц от их энергии в системе центра масс было проведено несколько серий расчетов при температурах 300 К и 1500 К при различных давлениях металлического пара. На рис. 1 маркерами представлены полученные значения вероятности образования долгоживущего димера в различных интервалах энергии $(\varepsilon, \Delta\varepsilon)$, полученные при различных внешних условиях, а сплошной линией – результат их усреднения. Для полученных результатов погрешности усреднения не пре-

превышают 13 %, хотя плотности металлического пара ρ и температуры T могли отличаться в 3–5 раз. Таким образом, полученная зависимость вероятности от энергии $p^+(\varepsilon, \Delta\varepsilon)$ не зависит от температуры и плотности пара.

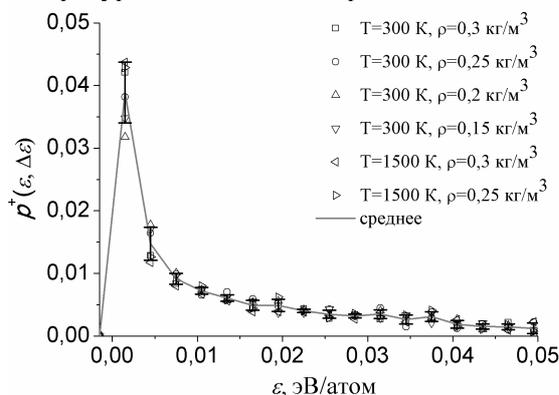


Рис. 1. Вероятность образования долгоживущего димера при столкновении частиц в зависимости от их энергии ($\Delta\varepsilon = 3 \cdot 10^{-3}$ эВ) в системе центра масс

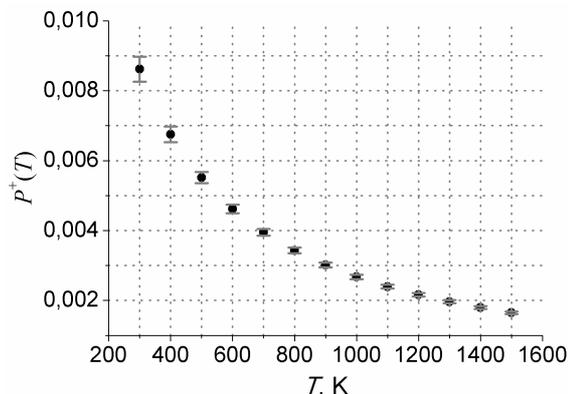


Рис. 2. Вероятность образования долгоживущей системы при столкновении двух свободных атомов меди в зависимости от температуры

На рис. 1 видно, что образование устойчивого димера более вероятно, если сталкивающиеся частицы имеют малую энергию в системе центра масс. Высота и ширина пика вероятности зависят от выбора величины шага по энергии $\Delta\varepsilon$. Чем меньше этот интервал, тем точнее описывается теоретическая зависимость $p^+(\varepsilon)$. Однако, уменьшение интервала $\Delta\varepsilon$ приводит к уменьшению объема выборки и, тем самым, к потере статистической достоверности. Поэтому расчеты интегральной оценки вероятности $P^+(T)$ были проведены для различных $\Delta\varepsilon$ (от 10^{-3} эВ до 10^{-2} эВ), а результаты были усреднены.

На рис. 2 представлены результаты интегральной оценки вероятности (3) образования долгоживущей системы при столкновении двух свободных атомов меди в зависимости от температуры $P^+(T)$, полученных с помощью усредненных данных для $p^+(\varepsilon, \Delta\varepsilon)$. Как и ожидалось, понижение температуры делает более вероятными низкоэнергетические столкновения, которые приводят к образованию долгоживущего кластера.

Отметим, что использование в выражении (3) функции распределения Максвелла по энергии требует соблюдение принципа детального равновесия. Нуклеация представляет собой лавинообразный процесс в неравновесной многофазной среде и возможность применения положений молекулярно-кинетической теории в условиях нуклеации требует специального исследования.

Заключение

На основе компьютерного моделирования показано, что в результате столкновения двух атомов металла может образоваться неустойчивый димер, время существования которого сравнимо со временем между соударениями атомов металла ($\sim 10^{-9}$ с). Вероятность этого события определяется энергией столкновения и не зависит от температуры и плотности паров металла. Температура атомов металла влияет на распределение атомов по энергии: при понижении температуры от 1500 К до 300 К интегральная вероятность образования долгоживущего димера в двухчастичном взаимодействии растет от 0,16 % до 0,86 %.

Авторы выражают благодарность проф. Н. Д. Кундиковой за полезные обсуждения.

Авторы выражают благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований за финансовую поддержку, грант РФФИ № 15- 03-04182.

Литература

1. Synthesis of ferrofluid based nanoarchitected polypyrrole composites and its application for electromagnetic shielding / S. Varshney, A. Ohlan, V. K. Jain *et al.* // *Materials Chemistry and Physics*. – 2014. – Vol. 143, no. 2. – P. 806–813.
2. Copper-Zinc Alloy Nanopowder: A Robust Precious-Metal-Free Catalyst for the Conversion of 5-Hydroxymethylfurfural / G. Bottari, A.J. Kumalapatni, K.K. Krawczyk *et al.* // *ChemSusChem*. – 2015. – Vol. 8, Issue 8. – P. 1323–1327.

3. Hydrogen generation from water using Mg nanopowder produced by arc plasma method / M. Uda, H. Okuyama, T. S. Suzuki, Y. Sakka // *Science and Technology of Advanced Materials*. – 2012. – Vol. 13, Issue 2. – Article: 025009.
4. Air-stable, surface-oxide free Cu nanoparticles for highly conductive Cu ink and their application to printed graphene transistors / S. Jeong, S.H. Lee, Y. Jo *et al.* // *J. Mater. Chem.* – 2013. – Vol. 1, Issue 15. – P. 2704–2710.
5. Sharifi, I. Ferrite-based magnetic nanofluids used in hyperthermia applications / I. Sharifi, H. Shokrollahi, S. Amiri // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2012. – Vol. 324, Issue 6. – P. 903–915.
6. Смирнов, Б.М. Генерация кластерных пучков / Б.М. Смирнов // *УФН*. – 2003. – Т. 173, № 6. – С. 609–648.
7. Гончаров, А.В. Моделирование процессов образования и роста кластеров при конденсации атомарного пара / А.В. Гончаров, П.В. Каштанов // *ТВТ*. – 2011. – Т. 49, № 2. – С. 187–195.
8. Смирнов, Б.М. Кластеры и фазовые переходы / Б.М. Смирнов // *УФН*. – 2007. – Т. 177, № 4. – С. 369–373.
9. Plimpton, S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics / S. Plimpton // *Journal of Computational Physics*. – 1995. – Vol. 117, no. 1. – P. 1–19.
10. Foiles, S.M. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys / S.M. Foiles, M.S. Daw, M.I. Baskes // *Phys. Rev. B*. – 1986. – Vol. 33, no. 12. – P. 7983–7991.
11. Kesälä, E. Molecular dynamics simulation of pressure dependence of cluster growth in inert gas condensation / E. Kesälä, A. Kuronen, K. Nordlund // *Phys. Rev. B*. – 2007. – Vol. 75, Issue 17. – P. 174121.
12. Korenchenko, A.E. Statistical analysis of formation and relaxation of atomic clusters based on data of molecular-dynamic modeling of gas-phase nucleation of metallic nanoparticles / A.E. Korenchenko, A.G. Vorontsov, B. R. Gel'chinskii // *High Temperature*. – 2016. – Vol. 54, no. 2. – p. 229–234.
13. Газофазный метод получения порошков / И.В. Фришберг, Л.И. Кватер, Б.П. Кузьмин, С.В. Грибовский. – М.: Наука 1978. – 223 с.
14. Гусев, А.И. Наноматериалы, наноструктуры, нанотехнологии / А.И. Гусев. М.: Физматлит, 2007. – 416 с.
15. Матвеев, А.Н. Молекулярная физика / А.Н. Матвеев. – СПб.: Лань, 2010. – 364 с.

Поступила в редакцию 10 ноября 2016 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2017, vol. 9, no. 2, pp. 72–77*

DOI: 10.14529/mmph170209

ESTIMATED PROBABILITY OF COPPER LONG-LIVED DIMER FORMATION IN TWO PARTICLE COLLISIONS BASED ON THE MOLECULAR DYNAMICS SIMULATION

G.P. Sannikov, A.E. Korenchenko

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: sannikovgrigi@gmail.com

Knowing the mechanisms of birth, growth and development of nanoparticles is important for optimization of their production techniques. The majority of nanoparticles production methods implies self-assembly from the liquid or gas phase. The initial stage of homogeneous nucleation from atomic vapor to a considerable degree specifies the ultimate size distribution of particles, which determines the topicality of its study. The paper presents a statistical analysis of the results of molecular dynamics simulation of metal (Cu) vapor nucleation in the inert gas atmosphere (Ar). The peculiar features of the initial stage of nucleation to estimate probability of diatomic molecule growth (Cu₂) in the

supersaturated nonequilibrium medium are considered. It's shown that as a result of collision of two metal atoms an unstable dimer can be formed, which lifetime is comparable to time between metal atom collisions. Based on the results of the statistical analysis we assess the differential probability of forming the long-lived unstable dimer in two-particle interactions depending on the energy value of colliding particles in the system of their mass center. The integration of differential probability in terms of all energies with regard to theoretical energy distribution of copper atoms at the given temperature has allowed us to arrive at an integral estimate of the probability of forming the long-lived dimer in the Cu–Cu collision. It's been discovered that when increasing the temperature in the range of 300–1500 K the probability of formation is decreased from 0,86 % to 0,16 %.

Keywords: metal nanoparticles; gas-phase synthesis; homogeneous nucleation.

References

1. Varshney S., Ohlan A., Jain V.K., Dutta V.P., Dhawan S.K. Synthesis of ferrofluid based nanoarchitected polypyrrole composites and its application for electromagnetic shielding. *Materials Chemistry and Physics*, 2014, Vol. 143, no. 2, pp. 806–813. DOI: 10.1016/j.matchemphys.2013.10.018
2. Bottari G., Kumalapatni A.J., Krawczyk K.K., Feringa B.L., Heeres H.J., Barta K. Copper-Zinc Alloy Nanopowder: A Robust Precious-Metal-Free Catalyst for the Conversion of 5-Hydroxymethylfurfural. *ChemSusChem*, 2015, Vol. 8, Issue 8, pp. 1323–1327. DOI: 10.1002/cssc.201403453
3. Uda M., Okuyama H., Suzuki T.S., Sakka Y. Hydrogen generation from water using Mg nanopowder produced by arc plasma method. *Science and Technology of Advanced Materials*, 2012, Vol. 13, Issue 2, Article: 025009. DOI: 10.1088/1468-6996/13/2/025009
4. Jeong S., Lee S.H., Jo Y., Lee S.S., Seo Y.H., Ahn B.W., Choi Y. Air-stable, surface-oxide free Cu nanoparticles for highly conductive Cu ink and their application to printed graphene transistors. *J. Mater. Chem. C*, 2013, Vol. 1, Issue 15, pp. 2704–2710. DOI: 10.1039/C3TC00904A
5. Sharifi I., Shokrollahi H., Amiri S. Ferrite-based magnetic nanofluids used in hyperthermia applications. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 2012, Vol. 324, Issue 6, pp. 903–915. DOI: 10.1016/j.jmmm.2011.10.017
6. Smirnov B.M. Generation of Cluster Beams. *Physics–Uspekhi*, 2003, Vol. 46, no. 6, pp. 589–628. DOI: 10.1070/PU2003v046n06ABEH001381
7. Goncharov A.V., Kashtanov P.V. Modeling of Cluster Formation and Growth under Atomic Vapor Condensation. *High Temperature*, 2011. Vol. 49, no. 2, pp. 178–186. DOI: 10.1134/S0018151X11010068
8. Smirnov B.M. Clusters and phase transitions. *Physics–Uspekhi*, 2007, Vol. 50, no. 4, p. 354–358. DOI: 10.1070/PU2007v050n04ABEH006235
9. Plimpton S. Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics. *Journal of Computational Physics*, 1995, Vol. 117, Issue 1. P. 1–19. DOI: 10.1006/jcph.1995.1039
10. Foiles S.M., Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys. *Phys. Rev. B*, 1986, Vol. 33, no. 12, pp. 7983–7991. DOI: 10.1103/PhysRevB.33.7983
11. Kesälä E., Kuronen A., Nordlund K. Molecular dynamics simulation of pressure dependence of cluster growth in inert gas condensation. *Phys. Rev. B*, 2007, Vol. 75, Issue 17, p. 174121. DOI: 10.1103/PhysRevB.75.174121
12. Korenchenko A.E., Vorontsov A.G., Gel'chinskii B.R. Statistical analysis of formation and relaxation of atomic clusters based on data of molecular-dynamic modeling of gas-phase nucleation of metallic nanoparticles. *High Temperature*, 2016, Vol. 54, no. 2, pp. 229–234. DOI: 10.1134/S0018151X16020103
13. Frishberg I.V., Kvater L.I., Kuz'min B.P., Gribovskiy S.V. *Gazofaznyy metod polucheniya poroshkov* (Gas-phase method of powder formation). Moscow, Nauka Publ., 1978, 223 p. (in Russ.).
14. Gusev A.I. *Nanomaterialy, nanostruktury, nanotekhnologii* (Nanomaterials, nanostructures, nanotechnologies). Moscow, Fizmatlit Publ., 2007, 416 p. (in Russ.).
15. Matveev A.N. *Molekulyarnaya fizika* (Molecular physics). Spb, Lan' publ., 2010, 364 p. (in Russ.).

Received November 10, 2016

Серия основана в 2009 году.

Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-57362 выдано 24 марта 2014 г. Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

Решением Президиума Высшей аттестационной комиссии Министерства образования и науки Российской Федерации журнал включен в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук» по следующим отраслям наук и группам специальностей: 01.01.00 – математика; 01.02.00 – механика; 01.04.00 – физика.

Журнал включен в Реферативный журнал и Базы данных ВИНТИ. Сведения о журнале ежегодно публикуются в международных справочных системах по периодическим и продолжающимся изданиям “Ulrich’s Periodicals Directory”, “Zentralblatt MATH”.

Подписной индекс 29211 в объединенном каталоге «Пресса России», E29211 в Интернет-каталоге агентства «Книга-Сервис».

Периодичность выхода – 4 номера в год.

ТРЕБОВАНИЯ К ПУБЛИКАЦИИ СТАТЬИ

1. Публикуются оригинальные работы, содержащие существенные научные результаты, не опубликованные в других изданиях, прошедшие этап научной экспертизы и соответствующие требованиям к подготовке рукописей.

2. В редакцию предоставляется электронная (документ MS Word 2003) версия работы объемом не более 6 страниц, экспертное заключение о возможности опубликования работы в открытой печати, сведения об авторах (Ф.И.О., место работы, звание и должность для всех авторов работы), контактная информация ответственного за подготовку рукописи.

3. Структура статьи: УДК, название (не более 12–15 слов), список авторов, аннотация (150–250 слов), список ключевых слов, текст работы, литература (в порядке цитирования, в скобках, если это возможно, дается ссылка на оригинал переводной книги или статьи из журнала, переводящегося на английский язык). После текста работы следует название, расширенная аннотация (реферат статьи) объемом до 1800 знаков с пробелами, список ключевых слов и сведения об авторах на английском языке.

4. Параметры набора. Поля: зеркальные, верхнее – 23, нижнее – 23, внутри – 22, снаружи – 25 мм. Шрифт – Times New Roman 11 pt, масштаб 100 %, интервал – обычный, без смещения и анимации. Отступ красной строки 0,7 см, интервал между абзацами 0 pt, межстрочный интервал – одинарный.

5. Формулы. Стиль математический (цифры, функции и текст – прямой шрифт, переменные – курсив), основной шрифт – Times New Roman 11 pt, показатели степени 71 % и 58 %. Выключенные формулы должны быть выровнены по центру.

6. Рисунки все черно-белые. Желательно предоставить рисунки и в виде отдельных файлов.

7. Адрес редакции журнала «Вестник ЮУрГУ» серии «Математика. Механика. Физика»:

Россия 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76, Южно-Уральский государственный университет, факультет математики, механики и компьютерных технологий, кафедра математического и компьютерного моделирования, ответственному редактору профессору Загребинной Софье Александровне. [Prof. Zagrebina Sophiya Aleksandrovna, Mathematical and Computer Modeling Department, SUSU, 76, Lenin prospect, Chelyabinsk, Russia, 454080].

8. Адрес электронной почты: mmph@susu.ru

9. Полную версию правил подготовки рукописей и пример оформления можно загрузить с сайта журнала: см. <http://vestnik.susu.ru/mmph>.

10. Журнал распространяется по подписке. Электронная версия: см. www.elibrary.ru, <http://vestnik.yourgpu.rf/mmph>.

11. Плата с аспирантов за публикацию не взимается.

Редактор *О. Шаханская*
Техн. редактор *А.В. Миних*

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 24.04.2017. Дата выхода в свет 02.05.2017.

Формат 60×84 1/8. Печать цифровая. Усл. печ. л. 9,93.

Тираж 500 экз. Заказ 132/256. Цена свободная.

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ. 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.