



УЧЕНЫЕ ЗАПИСКИ
КАЗАНСКОГО
УНИВЕРСИТЕТА
СЕРИЯ
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ НАУКИ

Том 165

Книга 3

2023

Ученые записки Казанского университета.

Серия Физико-математические науки

рецензируемый научный журнал

2023

Т. 165, кн. 3

УЧЕНЫЕ ЗАПИСКИ КАЗАНСКОГО УНИВЕРСИТЕТА ОСНОВАНЫ В 1834 ГОДУ

Редакционная коллегия

Главный редактор

Д.А. Таюрский – д-р физ.-мат. наук, проф., Казанский федеральный университет, г. Казань, Россия

Члены редколлегии

А.М. Елизаров (зам. гл. редактора) – д-р физ.-мат. наук, проф., Казанский федеральный университет, г. Казань, Россия

И.С. Александрова (секретарь) – Казанский федеральный университет, г. Казань, Россия

М.М. Арсланов – д-р физ.-мат. наук, проф., Казанский федеральный университет, г. Казань, Россия

Е. Бенова – д-р наук, Софийский университет, г. София, Болгария

Р.З. Даутов – д-р физ.-мат. наук, проф., Казанский федеральный университет, г. Казань, Россия

А.Г. Егоров – д-р физ.-мат. наук, ст. науч. сотр., Казанский федеральный университет, г. Казань, Россия

Э. Лайтинен – д-р наук, Университет Оулу, г. Оулу, Финляндия

Р.Х. Латыпов – д-р техн. наук, проф., Казанский федеральный университет, г. Казань, Россия

В.Н. Паймушин – д-р физ.-мат. наук, проф., Казанский национальный технический университет им. А.Н. Туполева – КАИ, Казанский федеральный университет, г. Казань, Россия

Ю.Г. Смирнов – д-р физ.-мат., проф., Пензенский государственный университет, г. Пенза, Россия

В.Ф. Тишкин – д-р физ.-мат., чл.-кор. РАН, Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, г. Москва, Россия

О.Н. Шерстюков – д-р физ.-мат. наук, доц., Казанский федеральный университет, г. Казань, Россия

Ю.В. Шестопалов – д-р физ.-мат. наук, проф., МИРЭА – Российский технологический университет, г. Москва, Россия

М. Шнейдер – д-р наук, Принстонский университет, г. Принстон, США

Ю.И. Шокин – д-р физ.-мат. наук, академик РАН, Институт вычислительных технологий СО РАН, г. Новосибирск, Россия

Редактор английского текста *А.О. Кармазина*

Учредитель и издатель: ФГАОУ ВО «Казанский (Приволжский) федеральный университет»

Журнал зарегистрирован в Федеральной службе по надзору

в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций

Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-41875 от 27 августа 2010 г.

Журнал реферируется/индексируется в Scopus, DOAJ, EBSCO, eLIBRARY.RU, Emerging Sources Citation Index, Google Scholar, Mathematical Reviews, Math-Net.Ru, ZbMath, Ulrich's Periodicals Directory, WorldCat, КиберЛенинка

Подписной индекс 19423. Цена свободная

Адрес издателя и редакции «Ученые записки Казанского университета»: 420008, г. Казань, ул. Кремлевская, д. 18
Телефон: (843) 233-73-01; e-mail: uz.ku@kpfu.ru; сайт: <http://kpfu.ru/uz-rus/phm>

Дата выхода в свет 27.12.2023.
Формат 70×108/16. Бумага офсетная.
Усл. печ. л. 11,79. Уч.-изд. л. 8,96.
Тираж 300 экз. Заказ 209/12

Отпечатано в типографии Издательства
Казанского университета
420008, Казань, ул. проф. Нужина, д. 1/37

ISSN 2541-7746 (Print)
ISSN 2500-2198 (Online)

Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta.

Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki

[Proceedings of Kazan University. Physics and Mathematics Series]

Peer - Reviewed Scientific Journal

2023

Vol. 165

no. 3

UCHENYE ZAPISKI KAZANSKOGO UNIVERSITETA FOUNDED IN 1834

Editorial Board

Editor-in-Chief

Dmitrii A. Tayurskii – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Kazan Federal University, Kazan, Russia

Members of Editorial Board

Alexander M. Elizarov (Deputy Editor-in-Chief) – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Kazan Federal University, Kazan, Russia

Irina S. Aleksandrova (Secretary) – Kazan Federal University, Kazan, Russia

Marat M. Arslanov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Kazan Federal University, Kazan, Russia

Evgenia Benova – Doctor of Science, Sofia University, Sofia, Bulgaria

Rafail Z. Dautov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Kazan Federal University, Kazan, Russia

Andrey G. Egorov – Doctor of Physics and Mathematics, Senior Research Fellow, Kazan Federal University, Kazan, Russia

Erkki Laitinen – Doctor of Science, University of Oulu, Oulu, Finland

Rustam Kh. Latypov – Doctor of Technical Sciences, Professor, Kazan Federal University, Kazan, Russia

Vitalii N. Paimushin – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, A.N. Tupolev Kazan National Research Technical University – KAI, Kazan Federal University, Kazan, Russia

Yury G. Smirnov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, Penza State University, Penza, Russia

Vladimir F. Tishkin – Doctor of Physics and Mathematics, Corresponding Member of Russian Academy of Sciences, M.V. Keldysh Institute of Applied Mathematics of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russia

Oleg N. Sherstyukov – Doctor of Physics and Mathematics, Associate Professor, Kazan Federal University, Kazan, Russia

Yury V. Shestopalov – Doctor of Physics and Mathematics, Professor, MIREA – Russian Technological University, Moscow, Russia

Mikhail Shneider – Doctor of Science, Princeton University, Princeton, USA

Yury I. Shokin – Doctor of Physics and Mathematics, Member of Russian Academy of Sciences, Siberian Branch of Russian Academy of Sciences, Novosibirsk, Russia

English Editor: *A.O. Karmazina*

Founder and Publisher: Federal State Autonomous Educational Institution of Higher Education
“Kazan (Volga Region) Federal University”

The journal is registered by the Federal Service for Supervision of Communications,
Information Technologies and Mass Media

Registration certificate PI No. FS77-41875 dated August 27, 2010

The journal is abstracted and/or indexed in Scopus, DOAJ, EBSCO, eLIBRARY.RU, Emerging Sources Citation Index, Google Scholar, Mathematical Reviews, Math-Net.Ru, ZbMath, Cyberleninka, Ulrich's Periodicals Directory, WorldCat

Subscription index: 19423. Free price

Contacts: Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta, ul. Kremlevskaya 18, Kazan, 420008 Russia
Phone: (843) 233-73-01; e-mail: uz.ku@kpfu.ru; сайт: <http://kpfu.ru/uz-eng/phm>

Date of publication: December 27, 2023.
Page size: 70×108/16. Offset printing. Conventional
printing sheet: 11.79. Publisher's signature: 8.96.
Circulation: 300 copies. Order: 209/12

Printed in KFU Publishing House
ul. Prof. Nuzhina 1/37, Kazan, 420008
Russia

© Kazan Federal University, 2023

СОДЕРЖАНИЕ

<i>Аристов А.И.</i> Анализ Пенлеве в применении к решениям типа бегущей волны и анализ энергетических оценок для нелинейного уравнения соболевского типа	182
<i>Даутов Р.З., Салимзянова Г.Р.</i> Консервативная полностью дискретная схема МКЭ для нелинейного уравнения Клейна–Гордона	190
<i>Заботин И.Я., Казаева К.Е., Шульгина О.Н.</i> Вариант метода отсечений с внутренними итерационными точками для задачи выпуклого программирования общего вида	208
<i>Карасева У.П., Фрейдин А.Б.</i> О влиянии напряжений на неравновесную вязкость стекол	219
<i>Кузнецова Е.Л., Жаворонок С.И.</i> Задача типа Стефана в композиционных материалах с произвольным числом подвижных границ фазовых превращений	236
<i>Лурье С.А., Белов П.А., Волков А.В.</i> Вариационная постановка задач термомеханики	246
<i>Невзорова А.О., Гизатуллин Б.Т.</i> Система автоматического построения графов знаний математических документов	264
<i>Сухов А.М., Романов А.Ю., Глушаков Е.В.</i> Маршрутизация в циркулянтных графах на основе виртуальной координатной системы	282
<i>Тушавина О.В., Егорова М.С.</i> Задачи тепломассопереноса в химически реагирующих пограничных слоях на затупленных телах	294
<i>Чепак-Гизбрехт М.В., Князева А.Г.</i> Моделирование процесса окисления интерметаллидов $TiAl$ и Ti_3Al вследствие зернограницной диффузии кислорода	307

CONTENTS

Aristov A.I. Painleve analysis of travelling wave solutions and analysis of energy estimates for a nonlinear Sobolev-type equation.....	182
Dautov R.Z., Salimzyanova G.R. A conservative fully discrete finite element scheme for the nonlinear Klein–Gordon equation.....	190
Zabotin I.Ya., Kazaeva K.E., Shulgina O.N. A cutting-plane method with internal iteration points for the general convex programming problem....	208
Karaseva U.P., Freidin A.B. On the effect of stress on the nonequilibrium viscosity of glasses.....	219
Kuznetsova E.L., Zhavoronok S.I. A Stefan problem for composite materials with an arbitrary number of moving phase-transition boundaries.....	236
Lurie S.A., Belov P.A., Volkov A.V. Variational formulation of thermomechanical problems.....	246
Nevzorova A.O., Gizatullin B.T. A system for automatic construction of knowledge graphs of mathematical documents.....	264
Sukhov A.M., Romanov A.Y., Glushak E.V. Routing in circulant graphs based on a virtual coordinate system.....	282
Tushavina O.V., Egorova M.S. Problems of heat and mass transfer in chemically reacting boundary layers on blunted bodies.....	294
Chepak-Gizbrekht M.V., Knyazeva A.G. Modeling the oxidation process of TiAl and Ti ₃ Al intermetallic compounds due to grain-boundary diffusion of oxygen.....	307

ОРИГИНАЛЬНАЯ СТАТЬЯ

УДК 517

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.182-189

АНАЛИЗ ПЕНЛЕВЕ В ПРИМЕНЕНИИ К РЕШЕНИЯМ ТИПА БЕГУЩЕЙ ВОЛНЫ И АНАЛИЗ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ОЦЕНОК ДЛЯ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ СОБОЛЕВСКОГО ТИПА

А. И. Аристов

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
г. Москва, 119991, Россия*

*Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» РАН,
г. Москва, 119333, Россия*

МИРЭА – Российский технологический университет, г. Москва, 119454, Россия

Аннотация

Неограниченные решения нелинейных уравнений в частных производных представляют значительный интерес. Во многих случаях энергетические оценки позволяют доказать, что решение обращается в бесконечность на ограниченном промежутке времени, и оценить размер этого промежутка. В настоящей работе рассмотрено уравнение, для которого энергетические оценки не позволяют выявить случаи такого качественного поведения решений, однако с помощью анализа Пенлеве удаётся изучить класс неограниченных решений.

Ключевые слова: нелинейное уравнение в частных производных, уравнение соболевского типа, тест Пенлеве, ряд Лорана, энергетическая оценка

Введение

Статья посвящена изучению обобщенного уравнения Осколкова–Бенджамена–Бона–Махони–Бюргерса

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Delta u - u) + b\Delta u + (\kappa; \nabla)u + (\lambda; \nabla)u^p + \theta u = 0. \quad (1)$$

Здесь u зависит от трехмерного вектора пространственных переменных x и времени $t \geq 0$, а параметры $\kappa, \lambda \in R^3$, $b, \theta \in R$, $p \in N \setminus \{1\}$ постоянны. Поясним, что под выражениями $(\kappa; \nabla)$ и $(\lambda; \nabla)$ мы подразумеваем линейные комбинации первых производных по пространственным переменным. Если записать покомпонентно $\kappa = (\kappa_1; \kappa_2; \kappa_3)$, то

$$(\kappa; \nabla) = \sum_{k=1}^3 \kappa_k \frac{\partial}{\partial x_k}.$$

Аналогично зададим $(\lambda; \nabla)$. Приведенное уравнение может использоваться для описания нестационарных процессов в полупроводниковой среде: подробный вывод подобных уравнений дан в [1–3].

Интересен вопрос о качественном поведении неограниченных решений уравнений. Во многих случаях эффективны энергетические оценки: они позволяют установить условия, при которых решение разрушается, т. е. существует на промежутке $t \in [0; T)$ с некоторым конечным T , но не на луче $t \in [0; \infty)$. Кроме того, энергетические оценки позволяют оценить сверху и снизу время существования T . Однако, как будет показано, эти оценки не всегда позволяют получить результаты такого характера. Далее сузим множество изучаемых решений рассматриваемого уравнения до решений типа бегущей волны и применим к соответствующему обыкновенному дифференциальному уравнению тест Пенлеве. Такое исследование позволяет выяснить, при каких условиях общее решение уравнения можно записать в виде ряда Лорана с подвижным полюсом, порядок которого определяется видом уравнения.

1. О начально-краевой задаче

Рассмотрим начально-краевую задачу для уравнения (1):

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial t}(\Delta u - u) + b\Delta u + (\kappa; \nabla)u + (\lambda; \nabla)u^p + \theta u = 0; \\ u(x; 0) = u_0(x); \\ u(x; t)|_{\partial\Omega} = 0. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь $x \in \Omega$, Ω – ограниченное подмножество R^3 с границей $\partial\Omega \in C^{(2;\delta)}$, $\delta \in (0; 1]$, $t \geq 0$, $u_0(\cdot) \in H_0^1(\Omega)$; b и θ – действительные постоянные, κ и λ – постоянные трехмерные векторы.

Введем классы $X_T = C^1[0; T; H_0^1(\Omega)]$, $0 < T \leq \infty$.

Определение 1. Обобщенным решением задачи (2) назовем элемент u пространства X_T с некоторым T , для которого выполняются условия

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \left(\frac{\partial}{\partial t}(\Delta u - u) + b\Delta u + (\kappa; \nabla)u + (\lambda; \nabla)u^p + \theta u \right) w dx = 0; \\ u(x; 0) = u_0(x) \end{cases} \quad (3)$$

для всех $w \in H_0^1(\Omega)$ и $t \in [0; T)$.

Определение 2. Говорят, что решение задачи (2) разрушается за конечное время, если эта задача имеет решение $u \in X_T$ с некоторым конечным T , но не имеет решения из класса X_{∞} .

Теорема 1. Для любого начального условия $u_0(\cdot) \in H_0^1(\Omega)$ существует такое значение $T > 0$ (возможно, $T = \infty$), что существует единственное решение задачи (2) из класса X_T .

Доказательство этого утверждения основано на принципе сжимающих отображений. Аналогичные рассуждения можно найти в [2, гл. 5, §11]. Обсудим подробнее, каким может быть время существования решения T .

Теорема 2. Решение данной задачи не разрушается, т. е. $T = \infty$.

Доказательство. Введем обозначения

$$\|\cdot\| = \|\cdot\|_{L_2(\Omega)}, \quad \Phi = \|u\|^2 + \|\nabla u\|^2.$$

Выберем в интегральном тождестве (3) $w = u$ и упростим это равенство:

$$-\frac{\Phi'}{2} - b\|\nabla u\|^2 + \int_{\Omega} u(\kappa; \nabla)u dx + \int_{\Omega} u(\lambda; \nabla)u^p dx + \theta\|u\|^2 = 0.$$

С помощью формулы Остроградского–Гаусса можно показать, что члены с κ и λ равны нулю. Поэтому

$$\Phi' = 2\theta\|u\|^2 - 2b\|\nabla u\|^2.$$

Следовательно,

$$\Phi' \leq 2|\theta|\|u\|^2 + 2|b|\|\nabla u\|^2 \leq 2\max(|\theta|, |b|)(\|u\|^2 + \|\nabla u\|^2),$$

значит, $\Phi' \leq \mu\Phi$, где $\mu = 2\max(|\theta|, |b|)$. Из теоремы 1 видно, что тривиальным начальным данным соответствует неразрушающееся тривиальное решение, а если начальные данные нетривиальны, то $\Phi_0 \neq 0$. Положим $\Phi(t) = e^{\mu t}y(t)$, тогда после упрощений придем к неравенству $y' \leq 0$. Проинтегрировав его от 0 до t , получим

$$y(t) \leq y(0) \Leftrightarrow \Phi(t) \leq \Phi(0)e^{\mu t}.$$

Значит, в любой конечный момент времени функционал энергии Φ принимает конечное значение, хотя не исключается его стремление к бесконечности, когда $t \rightarrow \infty$. Заметим теперь, что

$$\|u\|_{H_0^1(\Omega)} = \|\nabla u\| \leq \sqrt{\Phi},$$

поэтому условие, что Φ принимает конечные значения, обеспечивает существование $u(\cdot)$ как элемента $H_0^1(\Omega)$ при любом положительном t . Следовательно, решение начально-краевой задачи не разрушается за конечное время, т. е. $T = \infty$, что и требовалось доказать.

Замечание. При исследовании многих задач на разрушение важную роль играет функционал энергии Φ , поскольку он позволяет оценить $\|u\|_{H_0^1(\Omega)}$ не только сверху, но и снизу. Действительно, теорема вложения Соболева позволяет утверждать, что существует такая постоянная k , что $\|u\| \leq k\|u\|_{H_0^1(\Omega)} = k\|\nabla u\|_{L_2(\Omega)}$ для всех $u(\cdot) \in H_0^1(\Omega)$, поэтому

$$\|u\|_{H_0^1(\Omega)}^2 \leq \Phi \leq (1 + k^2)\|u\|_{H_0^1(\Omega)}^2,$$

т. е. $\|u\|_{H_0^1(\Omega)}$ принимает конечные значения тогда и только тогда, когда Φ принимает конечные значения.

2. Об анализе Пенлеве обыкновенных дифференциальных уравнений

Теперь исследуем неограниченные решения типа бегущей волны уравнения (1).

Положим в (1) $u = v(z)$, где $z = (\alpha; x) + t + z_0$, а $\alpha = \text{const} \in R^N$ и $z_0 = \text{const} \in R$ произвольны. Придем к обыкновенному дифференциальному уравнению

$$v''' + bv'' + cv' + dv^{p-1}v' + \mu v = 0, \quad (4)$$

где $c = ((\kappa; \alpha) - 1)/(\alpha; \alpha)$, $d = p(\lambda; \alpha)/(\alpha; \alpha)$, $\mu = \theta/(\alpha; \alpha)$.

Дальнейшее исследование состоит в том, чтобы применить к уравнению (4) тест Пенлеве. Такое исследование обыкновенного дифференциального уравнения состоит в том, чтобы узнать, при каких условиях возможно представление его общего решения в виде ряда Лорана

$$v(z) = \sum_{m=0}^{\infty} A_m(z - z_0)^{m-\nu},$$

где $\nu = \text{const} \in N$, а z_0 и какие-то два из коэффициентов A_m произвольны, т. е. общее количество произвольных параметров равно порядку уравнения (см. [4, гл. 10] и [3]). Исследование состоит из трех этапов.

- На первом этапе нужно найти начальный член разложения $A_0(z - z_0)^{-\nu}$. Если получим ненулевую постоянную A_0 и натуральную постоянную ν , то перейдем к следующему этапу, иначе тест не пройден.
- На втором этапе нужно найти индексы Фукса $m_1, \dots, m_{N-1}$, где N – порядок уравнения, т. е. номера членов ряда, в которых могут быть произвольные коэффициенты. Для этого составим алгебраическое относительно m уравнение степени N , которое должно иметь корень $m = -1$ и $(N - 1)$ различных целых неотрицательных корней (в противном случае тест не пройден).
- На третьем этапе нужно проверить, что коэффициенты с номерами $m = m_1, \dots, m = m_{N-1}$ действительно произвольны.

Если все этапы пройдены корректно, то уравнение проходит тест, т. е. имеет общее решение требуемого вида, иначе – не имеет.

3. Предварительный анализ

Применим к уравнению (4) тест Пенлеве. На первом этапе подставим в уравнение «нулевое приближение» – только начальный член разложения: $v = A_0 z^{-\nu}$ (пишем z , а не $(z - z_0)$, поскольку произвольная постоянная z_0 уже учтена в определении z). Тогда

$$\frac{A_0(-\nu)(-\nu-1)(-\nu-2)z^{-\nu-3} + bA_0(-\nu)(-\nu-1)z^{-\nu-2} + cA_0(-\nu)z^{-\nu-1} + dA_0^p(-\nu)z^{-\nu p-1} + \mu A_0 z^{-\nu}}{A_0 z^{-\nu}} = 0.$$

Здесь подчеркнуты ведущие члены, т. е. члены, соответствующие наибольшему по модулю отрицательным степеням z , на первых двух этапах существенную роль играют только они. «Укороченное уравнение», т. е. уравнение, содержащее только ведущие члены, должно выполняться тождественно:

$$A_0(-\nu)(-\nu-1)(-\nu-2)z^{-\nu-3} + dA_0^p(-\nu)z^{-\nu p-1} = 0. \quad (5)$$

Следовательно, указанные здесь степени z должны быть равны: $-\nu-3 = -\nu p-1 \Leftrightarrow \nu(p-1) = 2$. Решив эти уравнения в натуральных числах, получим два варианта: $\nu = 2, p = 2$ или $\nu = 1, p = 3$. Упростив (5), получим в этих случаях соответственно $A_0 = -12/d$ или $A_0 = \sqrt{-6/d}$. Далее рассмотрим подробнее эти случаи.

4. Индексы Фукса

На втором этапе ищем индексы Фукса. Для этого нужно подставить двучлен $v = A_0 z^{-\nu} + A_m z^{m-\nu}$ в «укороченное уравнение» ($v''' + dv^{p-1}v' = 0$). После упрощений получим следующее.

- Если $\nu = 2, p = 2$, то

$$A_m z^{m-5} [(m-2)(m-3)(m-4) - 12(m-2) + 24] + \dots = 0,$$

где под многоточием подразумеваются члены, пропорциональные A_m в более чем первой степени, которые, как можно показать, существенной роли не играют. Значит, выражение в квадратных скобках должно быть равно нулю, откуда следует, что $m \in \{-1; 4; 6\}$, т. е. индексы Фукса равны 4 и 6.

- Если $\nu = 1, p = 3$, то аналогичным образом получим, что индексы Фукса равны 3 и 4.

5. Случай 1

В первом случае общее решение уравнения должно иметь вид

$$v = A_0 z^{-2} + A_1 z^{-1} + A_2 + A_3 z + A_4 z^2 + A_5 z^3 + A_6 z^4 + O(z^5), \quad (6)$$

где A_4 и A_6 могут быть произвольными. Найдем условия, при которых они действительно произвольны.

Из (6) видно, что v''' задается с точностью до $O(z^2)$, поэтому, подставив (6) в уравнение и раскрыв скобки, будем учитывать члены до первой степени z включительно. А именно, получим равенство вида

$$\sum_{k=-5}^1 B_k z^k + O(z^2) = 0.$$

Оно должно выполняться тождественно, следовательно, $B_{-5} = B_{-4} = \dots = B_1 = 0$. Приходим к системе равенств

$$\begin{cases} z^{-5} : -24A_0 - 2dA_0^2 = 0; \\ z^{-4} : -3dA_0A_1 - 6A_1 + 6bA_0 = 0; \\ z^{-3} : -dA_1^2 - 2dA_0A_2 - 2cA_0 + 2bA_1 = 0; \\ z^{-2} : \mu A_0 - dA_1A_2 - cA_1 - dA_0A_3 = 0; \\ z^{-1} : 0A_4 + \mu A_1 = 0; \\ 1 : (6 + dA_0)A_5 + [2b + dA_1]A_4 + \mu A_2 + cA_3 + dA_2A_3 = 0; \\ z : [24 + 2dA_0]A_6 + [2c + 2dA_2]A_4 + 6bA_5 + dA_3^2 + \mu A_3 + 2dA_1A_5 = 0. \end{cases}$$

Из первых четырех равенств последовательно получим, что

$$A_0 = -\frac{12}{d}, \quad A_1 = \frac{12b}{5d}, \quad A_2 = \frac{b^2}{25d} - \frac{c}{d}, \quad A_3 = \frac{\mu}{d} + \frac{b^3}{125d}.$$

Из пятого равенства получим, что A_4 будет произвольным при *первом* условии непротиворечивости $b\mu = 0$. Из шестого равенства следует

$$A_5 = \frac{11b}{15}A_4 + \frac{b^5}{6 \cdot 25 \cdot 125d} - \frac{c\mu}{6d}.$$

Подставив полученные выражения в седьмое равенство, получим, что A_6 будет произвольным при *втором* условии непротиворечивости

$$8b^2A_4 + \frac{9b}{5} \left(\frac{b^5}{25 \cdot 125d} - \frac{c\mu}{d} \right) + \left(\frac{\mu}{d} + \frac{b^3}{125d} \right) \left(2\mu + \frac{b^3}{125} \right) = 0.$$

Отсюда видно, что $b = 0$, поскольку в противном случае A_4 не будет произвольным. Равенство при этом упростится до $\mu = 0$. Первое условие непротиворечивости будет выполнено. Таким образом, получаем следующие коэффициенты

$$A_0 = -\frac{12}{d}, \quad A_2 = -\frac{c}{d}, \quad A_1 = A_3 = A_5 = 0,$$

$A_{4,6}$ произвольны (при условии непротиворечивости $b = \mu = 0$).

6. Случай 2

Во втором случае (т. е. при $p = 3$, $\nu = 1$) общее решение уравнения должно иметь вид

$$v = A_0 z^{-1} + A_1 + A_2 z + A_3 z^2 + A_4 z^3 + O(z^4),$$

где A_3 и A_4 могут быть произвольными. Выясним, при каких условиях они действительно произвольны.

Рассуждая по аналогии с первым случаем, приходим к следующим выражениям $A_0 = \sqrt{-\frac{6}{d}}$; $A_1 = 0$; $A_2 = \frac{A_0 c}{6}$, $A_{3;4}$ произвольны при условиях $b = \mu = 0$.

Заключение

Итак, показано, что решение начально-краевой задачи для уравнения (1) из введенных классов X_T не разрушается за конечное время. С другой стороны, рассмотрены неограниченные решения типа бегущей волны уравнения (1). Для их изучения применен анализ Пенлеве – сформулируем его результаты в виде следующих теорем.

Теорема 3. Пусть $p = 2$, причем $b = \mu = 0$, т. е. уравнение (4) имеет вид

$$v''' + cv' + dvv' = 0.$$

Тогда это уравнение проходит тест Пенлеве, причем его общее решение имеет вид

$$v = -\frac{12}{d}z^{-2} - \frac{c}{d} + A_4 z^2 + A_6 z^4 + O(z^5),$$

где A_4 и A_6 произвольны (напомним, что третья произвольная постоянная, явным образом здесь не указанная, соответствует сдвигу по z).

Теорема 4. Пусть $p = 3$, причем $b = \mu = 0$, т. е. уравнение (4) имеет вид

$$v''' + cv' + dv^2 v' = 0.$$

Тогда это уравнение проходит тест Пенлеве, причем его общее решение имеет вид

$$v = A_0 z^{-1} + \frac{A_0 c}{6} z + A_3 z^2 + A_4 z^3 + O(z^4),$$

где $A_0 = \sqrt{-6/d}$, а коэффициенты A_3 и A_4 произвольны.

Теорема 5. При $p \geq 4$ уравнение (4) не проходит тест Пенлеве.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках реализации программы Московского центра фундаментальной и прикладной математики по соглашению № 075-15-2022-284.

Литература

1. Корпусов М. О. Разрушение в неклассических нелокальных уравнениях. М.: URSS, 2010. 374 с.
2. Свешников А.Г., Альшин А.Б., Корпусов М.О., Плетнер Ю.Д. Линейные и нелинейные уравнения соболевского типа. М.: Физматлит, 2007. 736 с.
3. Aristov A., Kholomeeva A., Moiseev E. Application of the Painleve test to a nonlinear partial differential equation // Lobachevskii J. Math. 2022. V. 43, No 7. P. 1553–1556. <https://doi.org/10.1134/S1995080222100031>.

4. Полянин А.Д., Зайцев В.Ф., Жуков А.И. Методы решения нелинейных уравнений математической физики и механики. М.: Физматлит, 2005. 256 с.

Поступила в редакцию 20.08.2023

Принята к публикации 14.09.2023

Аристов Анатолий Игоревич, доцент кафедры общей математики факультета вычислительной математики и кибернетики МГУ им. М.В. Ломоносова, занимается исследованием нелинейных уравнений в частных производных

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

Ленинские горы, д. 1, г. Москва, 119991, Россия

Федеральный исследовательский центр «Информатика и управление» Российской академии наук

ул. Вавилова, д. 44, корп. 2, г. Москва, 119333, Россия

МИРЭА – Российский технологический университет

просп. Вернадского, д. 78, г. Москва, 119454, Россия

E-mail: *ai_aristov@mail.ru*

ISSN 2541–7746 (Print)

ISSN 2500–2198 (Online)

UCHENYE ZAPISKI KAZANSKOGO UNIVERSITETA.

SERIYA FIZIKO-MATEMATICHESKIE NAUKI

(Proceedings of Kazan University. Physics and Mathematics Series)

2023, vol. 165, no. 3, pp. 182–189

ORIGINAL ARTICLE

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.182-189

Painleve Analysis of Travelling Wave Solutions and Analysis of Energy Estimates for a Nonlinear Sobolev-Type Equation

A.I. Aristov

Lomonosov Moscow State University, Moscow, 119991 Russia

Federal Research Center “Computer Sciences and Control”, Russian Academy of Sciences, Moscow, 119333 Russia

MIREA – Russian Technological University, Moscow, 119454 Russia

E-mail: *ai_aristov@mail.ru*

Received August 20, 2023; Accepted September 14, 2023

Abstract

There is considerable interest in studying unbounded solutions of nonlinear partial equations. In many cases, energy estimates can be used to prove that the solution tends to infinity in finite time, while also providing an estimate for the latter. Here, an equation in which energy estimates fail to gauge the cases when solutions exhibit such behavior was analyzed. A class of unbounded solutions was explored using the Painleve analysis.

Keywords: nonlinear partial equation, Sobolev-type equation, Painleve analysis, Laurent series

Acknowledgments. This study was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation as part of the program of the Moscow Center of Fundamental and Applied Mathematics (agreement no. 075-15-2022-284).

References

1. Korpusov M.O. *Razrushenie v neklassicheskikh nelokal'nykh uravneniyakh* [Blow-Up in Nonclassical Nonlocal Equations]. Moscow, URSS, 2010. 374 p. (In Russian)
2. Sveshnikov A.G., Al'shin A.B., Korpusov M.O., Pletner Yu.D. *Lineynye i nelineinye uravneniya sobolevskogo tipa* [Linear and Nonlinear Sobolev-Type Equations]. Moscow, Fizmatlit, 2007. 736 p. (In Russian)
3. Aristov A., Kholomeeva A., Moiseev E. Application of the Painleve test to a nonlinear partial differential equation. *Lobachevskii J. Math.*, 2022, vol. 43, no. 7, pp. 1553–1556. <https://doi.org/10.1134/S1995080222100031>.
4. Polyanin A.D., Zaitsev V.F., Zhurov A.I. *Metody resheniya nelineinykh uravnenii matematicheskoi fiziki i mekhaniki* [Methods for Solving Nonlinear Equations in Mathematical Physics and Mechanics]. Moscow, Fizmatlit, 2005. 256 p. (In Russian)

⟨ **Для цитирования:** Аристов А.И. Анализ Пенлеве в применении к решениям типа бегущей волны и анализ энергетических оценок для нелинейного уравнения соболевского типа // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. 2023. Т. 165, кн. 3. С. 182–189. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.182-189>. ⟩

⟨ **For citation:** Aristov A.I. Painleve analysis of travelling wave solutions and analysis of energy estimates for a nonlinear Sobolev-type equation. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2023, vol. 165, no. 3, pp. 182–189. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.182-189>. (In Russian) ⟩

ОРИГИНАЛЬНАЯ СТАТЬЯ

УДК 519.63

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.190-207

КОНСЕРВАТИВНАЯ ПОЛНОСТЬЮ ДИСКРЕТНАЯ СХЕМА МКЭ ДЛЯ НЕЛИНЕЙНОГО УРАВНЕНИЯ КЛЕЙНА–ГОРДОНА

Р. З. Даутов, Г. Р. Салимзянова

Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, 420008, Россия

Аннотация

Предложено семейство методов Петрова–Галеркина–МКЭ для решения нелинейного уравнения Клейна–Гордона. Дискретные схемы сформулированы в терминах решения задачи и его производной по времени и обеспечивают сохранение полной энергии на дискретном уровне. Численно исследована простейшая двухслойная схема подобного типа. На основе решения тестовых задач с гладкими решениями показано, что схема позволяет определить как решение задачи, так и его производную по времени с погрешностью порядка $O(h^2 + \tau^2)$ в среднеквадратической норме, где τ и h характеризуют шаги сетки по времени и пространству соответственно.

Ключевые слова: метод Петрова–Галеркина, метод конечных элементов, уравнение Клейна–Гордона, двухслойная схема

Введение

1. Нелинейное уравнение Клейна–Гордона (или нелинейное волновое уравнение)

$$u''(x, t) - \Delta u(x, t) + \varphi(u(x, t)) = 0 \quad (1)$$

является одним из классических уравнений теории нелинейных волн. Здесь $x = (x_1, x_2, \dots, x_d)$ – пространственная переменная, $u' = \partial u / \partial t$ – производная $u(x, t)$ по времени t , φ – заданная функция, Δ – оператор Лапласа,

$$\Delta u = \frac{\partial^2 u}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2 u}{\partial x_d^2}.$$

Многочисленные приложения уравнения (1) обусловлены достаточно типичным сочетанием модельной (квадратичной) дисперсии и нелинейности. Среди наиболее «востребованных» в приложениях нелинейностей выделим нелинейность

$$\varphi(u) = \sin u \quad (2)$$

(уравнение синус-Гордона) и кубическую нелинейность

$$\varphi(u) = -u + u^3. \quad (3)$$

Обзор задач, приводящих к уравнению Клейна–Гордона, можно найти в монографиях [1, 2]. Среди приложений этого уравнения отметим теории магнетиков, дислокаций, джозефсоновских переходов и целый ряд других областей физики.

Наряду с уравнением (1) большой интерес представляют его модификации вида

$$u'' - \operatorname{div}(a \operatorname{grad} u) + \varphi(u) = -\alpha u' + \beta \Delta u' + \gamma, \quad (4)$$

где a , α и β являются положительными постоянными или функциями. Слагаемые в правой части (4), а также функция a описывают наличие в моделируемой системе диссипативных эффектов, неоднородностей и других возмущений.

Если уравнение (1) (например, в случаях (2) и (3)) допускает точные аналитические решения, то модифицированное уравнение (4) слишком сложно для точного интегрирования, и его решения могут быть получены только приближенно с использованием численных методов.

2. Уравнение (1) является уравнением гиперболического типа, и для его приближенного решения могут быть использованы соответствующие известные численные методы. В связи с этим отметим следующие работы, посвященные сеточным методам (метод конечных разностей [3–7], метод конечных элементов [8, 9]), а также работы, посвященные бессеточным методам (спектральные и псевдоспектральные методы [10], дифференциальный метод квадратур [11], метод радиальных базисных функций [12] и т. д.).

Поскольку уравнение Клейна–Гордона описывает консервативные системы, то следует отметить, что консервативные численные схемы его решения демонстрируют лучшие результаты, чем неконсервативные, и при прочих равных условиях являются более точными. Ключевым моментом является то, что такие схемы сохраняют некоторые инвариантные свойства дифференциального уравнения и более точно воспроизводят особенности решения при вычислениях на больших отрезках времени. Для решения уравнения Клейна–Гордона нам известны только консервативные конечно-разностные схемы на ортогональных сетках (см., например, [6, 7]). Консервативные сеточные схемы на основе метода конечных элементов, предназначенные для решения задачи в произвольных областях, нам неизвестны.

3. Основной целью настоящей работы является численное исследование точности предлагаемого нами консервативного сеточного метода решения уравнения (1). Он также применим для решения уравнения (4). Первоначально введением новой переменной $v = u'$ уравнение сводится к системе уравнений, которая далее и аппроксимируется на основе комбинации метода конечных элементов (по пространственным переменным) и метода Петрова–Галеркина (по временной переменной). Метод является m -слойным и имеет формальный порядок аппроксимации $O(\tau^m + h^k)$, где τ и h характеризуют шаги сетки по времени и пространству соответственно, $m \geq 2$, $k \geq 1$. Результаты проведенных вычислительных экспериментов для двухслойной схемы на основе линейных треугольных конечных элементов позволяют утверждать, что метод эффективен и пригоден для практического использования.

1. Постановка задачи

1.1. Исходная задача. Пусть $T > 0$, Ω – ограниченная область в R^d с липшицевой границей Γ , $d \geq 1$, $Q_T = \Omega \times (0, T]$. Рассмотрим неоднородное уравнение Клейна–Гордона

$$u''(x, t) - \Delta u(x, t) + \varphi(u(x, t)) = f(x, t), \quad (x, t) \in Q_T, \quad (5)$$

при краевых условиях Дирихле¹

$$u(x, t) = \gamma(x, t), \quad (x, t) \in \Gamma \times (0, T].$$

¹Для удобства изложения будем считать, что функция γ определена в Q_T .

В начальный момент времени $t = 0$ решение уравнения и его производная по времени считаются известными:

$$u(x, 0) = u_0(x), \quad u'(x, 0) = v_0(x), \quad x \in \Omega. \quad (6)$$

Сформулированная выше задача является классической и хорошо исследованной, условиям существования ее обобщенных решений посвящено множество работ. В связи с этим отметим лишь статью [13] и книгу [14, Гл. 1]. Для определения дискретного метода нам понадобится ее обобщенная формулировка, изученная в [14, с. 20] в случае степенной функции φ . С этой целью введем дополнительные обозначения и определим пространства функций.

1.2. Пространства функций. Пусть $a \cdot b = \sum_i a_i b_i$ обозначает скалярное произведение векторов a и b , $|a| = (a \cdot a)^{1/2}$ – длина вектора a . Используем стандартные обозначения: ∇u – для градиента функции u ,

$$\nabla u = \left(\frac{\partial u}{\partial x_1}, \dots, \frac{\partial u}{\partial x_d} \right),$$

$L_p(\Omega)$ и $H^m(\Omega)$ – для обозначения пространств функций Лебега и Соболева, $p \in [1, \infty]$, $m \geq 1$, $H_0^1(\Omega) = \{u \in H^1(\Omega) : u|_{\Gamma} = 0\}$.

Положим $H = L_2(\Omega)$ и для конечного $p \geq 1$ определим пространства $V_p = H^1(\Omega) \cap L_p(\Omega)$ и $V_p^0 = H_0^1(\Omega) \cap L_p(\Omega)$. Через $(\cdot, \cdot)$ будем обозначать как скалярное произведение в $L_2(\Omega)$,

$$(u, v) = \int_{\Omega} u v \, dx,$$

так и отношение двойственности между V_p^0 и его сопряженным $H^{-1}(\Omega) + L_{p'}(\Omega)$, где p' определяется как сопряженный к p показатель, $1/p + 1/p' = 1$. Пусть также

$$(\nabla u, \nabla v) = \int_{\Omega} \nabla u \cdot \nabla v \, dx.$$

Отметим, что вложение

$$H^1(\Omega) \subset L_p(\Omega) \quad (7)$$

непрерывно при любом конечном p при $d \leq 2$ и $p \leq 2d/(d-2)$ при $d > 3$. Следовательно, при таких p имеем $V_p = H^1(\Omega)$, $V_p^0 = H_0^1(\Omega)$.

Далее для заданной функции u переменных $x \in \Omega$ и $t \in [0, T]$ под $u(t)$, $t \in [0, T]$, будем понимать функцию $x \rightarrow u(x, t)$, $x \in \Omega$. Подобные функции, определенные на $[0, T]$ со значениями в банаховом пространстве B функций от x , будем рассматривать как элементы пространства $L_p(0, T; B)$, т. е. пространства (классов) измеримых функций $[0, T] \rightarrow B$ таких, что

$$\|u\|_{L_p(0, T; B)} = \left(\int_0^T \|u(t)\|_B^p \, dt \right)^{1/p} < \infty, \quad 1 \leq p < \infty.$$

При $p = \infty$ норма в нем определяется функционалом $\sup_{t \in (0, T)} \|u(t)\|_B$ (подробнее, см., например, [13, с. 469]). Отметим, что $L_p(0, T; L_p(\Omega)) = L_p(Q)$.

1.3. Обобщенное решение задачи. Уравнение (5) перепишем в виде системы, введя дополнительное неизвестное $v = u'$:

$$v'(t) - \Delta u(t) + \varphi(u(t)) = f(t), \quad (8)$$

$$u'(t) = v(t), \quad (9)$$

где $t \in (0, T]$. Краевые и начальные условия примут вид

$$u(t)|_{\Gamma} = \gamma(t), \quad u(0) = u_0, \quad v(0) = v_0.$$

Считая, что функция φ является непрерывной на всей числовой оси, определим ее потенциал Φ :

$$\Phi(s) = \Phi_0 + \int_0^s \varphi(\xi) d\xi, \quad s \in R,$$

где постоянная Φ_0 может быть выбрана произвольно. Дополнительно будем предполагать, что для некоторого конечного $p \geq 1$ функция φ удовлетворяет следующим условиям:

$$(H_1) \quad \text{если } u \in V_p, \text{ то } \left| \int_{\Omega} \Phi(u(x)) dx \right| < \infty, \quad \varphi(u) \in L_{p'}(\Omega).$$

Относительно других данных задачи будем считать, что

$$(H_2) \quad f \in L_2(Q), \quad u_0 \in V_p, \quad v_0 \in H, \quad \gamma \text{ является следом на } \Gamma \times [0, T] \text{ некоторой функции } \eta \text{ из } L_{\infty}(0, T; V_p) \text{ такой, что } \eta' \in L_{\infty}(0, T; V_p^*).$$

Отметим, что функции, указанные в (2), (3), удовлетворяют условиям (H_1) при $p = 2$ (например) и $p = 4$ соответственно. В этом нетрудно убедиться, если принять во внимание неравенство Гельдера для интегралов и вложение (7).

Для определения обобщенного решения задачи умножим обе части уравнения (8) на произвольную функцию $\zeta \in L_2(0, T; V_p^0)$, а уравнение (9) – на произвольную функцию $\eta \in L_2(0, T; H)$. Полученные равенства проинтегрируем по области Q_T и учтем, что

$$- \int_{\Omega} \Delta u(t) \zeta(t) dx = \int_{\Omega} \nabla u(t) \cdot \nabla \zeta(t) dx,$$

поскольку $\zeta(t)|_{\Gamma} = 0$. В результате придем к тождествам

$$\int_0^T (v'(t), \zeta(t)) dt + \int_0^T a(u(t), \zeta(t)) dt = \int_0^T (f(t), \zeta(t)) dt, \quad (10)$$

$$\int_0^T (u'(t), \eta(t)) dt = \int_0^T (v(t), \eta(t)) dt, \quad (11)$$

где функционал a определен следующим образом:

$$a(u, \zeta) = \int_{\Omega} (\nabla u \cdot \nabla \zeta + \varphi(u) \zeta) dx. \quad (12)$$

Определение 1. Пару функций u, v , удовлетворяющую условиям

$$u - \gamma \in L_2(0, T; V_p^0), \quad u', v \in L_2(0, T; H), \quad v' \in L_2(0, T; V_p^*), \\ u(0) = u_0, \quad v(0) = v_0,$$

а также тождествам (10), (11) для всех $\zeta \in L_2(0, T; V_p^0)$, $\eta \in L_2(0, T; H)$, назовем обобщенным решением задачи (5)–(6).

Заметим, что при выполнении условий (H_1) , (H_2) , данное определение корректно в том смысле, что все слагаемые в тождествах (10), (11) являются конечными, а начальные условия имеют смысл (см., например, [14, Замечание 1.1, с. 21]).

Доказательство существования определенного выше обобщенного решения в случае, когда

$$\varphi(u) = |u|^{\rho} u, \quad \rho > 0, \quad \gamma = 0, \quad p = \rho + 2, \quad (13)$$

дано в [14, Теорема 1.1, с. 20]. Оно непосредственно обобщается для рассматриваемой нами задачи. Единственность решения имеет место при дополнительных к (H_1) условиях на функцию φ (например, условия липшиц-непрерывности оператора из V_p в V_p^* , порожденного этой функцией). Эти условия выполнены для функций (2), (3), а в случае (13) они приводят к ограничению $\rho \leq 2/(n-2)$ при $d > 3$ (см., например, [14, Теорема 1.2, с. 27]).

Отметим следующее важное и хорошо известное свойство решения рассматриваемой задачи, справедливое при $f = f(x)$, $\gamma = \gamma(x)$. Определим функционалы

$$\Pi(u) = \int_{\Omega} \left(\frac{1}{2} |\nabla u|^2 + \Phi(u) \right) dx, \quad E(v, u) = \frac{1}{2}(v, v) + \Pi(u) - (f, u),$$

которые будем называть функционалами потенциальной и полной энергии соответственно. Они определены на функциях $u \in V_p$ и $v \in H$. Справедливо утверждение (см., например, [14, Теорема 1.6, с. 36]):

$$E(v(t), u(t)) = E(v_0, u_0) \quad \text{для всех } t \in [0, T],$$

которое принято называть законом сохранения (полной) энергии.

2. Определение схемы Петрова–Галеркина–МКЭ

Укажем способ дискретизации поставленной выше задачи, обеспечивающий сохранение энергии на дискретном уровне. Его можно рассматривать как вариант метода Петрова–Галеркина с возмущениями, основанный на аппроксимациях, принятых в методе конечных элементов. Полностью дискретную схему получим последовательной дискретизацией задачи сначала по пространственным переменным, а затем – по переменной времени.

Для облегчения изложения далее будем предполагать, что Ω является многогранником в R^d .

2.1. Полудискретная схема МКЭ с численным интегрированием.

Пусть $h > 0$ означает максимальный размер конечных элементов, $T_h = \{K_1, K_2, \dots, K_\ell\}$ – точное разбиение (триангуляция) области Ω семейством лагранжевых конечных элементов $K_1, \dots, K_\ell$ какой-либо формы. На основе этого разбиения определим пространство конечных элементов

$$V_h = \{v_h \in C(\bar{\Omega}) : v_h|_K \in P_K \quad \forall K \in T_h\},$$

где P_K – некоторое конечномерное пространство функций на элементе K . Определим также его подпространство

$$V_h^0 = \{v_h \in V_h : v_h|_{\Gamma} = 0\}.$$

Пространство V_h (V_h^0) будем рассматривать как аппроксимацию $H^1(\Omega)$ ($H_0^1(\Omega)$). Ясно, что справедливы вложения $V_h \subset V_p$, $V_h^0 \subset V_p^0$.

Определим в V_h базис Лагранжа $\{\varphi_i(x)\}_{i=1}^N$, соответствующий множеству узлов интерполяции $\omega_h = \{a_i\}_{i=1}^N$, $N = N(h)$, т.е. функции $\varphi_i \in V_h$ такие, что $\varphi_i(a_j) = \delta_{ij}$, $i, j = 1, \dots, N$, где δ_{ij} – символ Кронекера. Тогда для произвольной функции $v_h \in V_h$ справедливо разложение

$$v_h(x) = \sum_{i=1}^N v_i \varphi_i(x),$$

где $v_i = v_h(a_i)$, $i = 1, \dots, N$ – узловые параметры функции v_h .

Функцию u_I из V_h назовем V_h -интерполянт функции $u \in C(\bar{\Omega})$, если $u_I(a_i) = u(a_i)$, $i = 1, \dots, N$, т. е. функцию

$$u_I(x) = \sum_{i=1}^N u(a_i) \varphi_i(x).$$

Для удобства изложения далее будем предполагать, что внутренние узлы сетки имеют номера от 1 до n , а граничные (лежащие на Γ) – от $n+1$ до N .

Для вычисления интеграла от функции f по конечному элементу K зададим некоторую квадратуру $S_K(f)$ с L узлами:

$$\int_K f(x) dx \approx \sum_{i=1}^L c_i^K f(d_i^K) = S_K(f),$$

где c_i^K , d_i^K – веса и узлы квадратуры. Квадратурную формулу для вычисления интеграла по области Ω определим как составную:

$$\int_{\Omega} f(x) dx = \sum_{K \in T_h} \int_K f(x) dx \approx \sum_{K \in T_h} S_K(f) = S_{\Omega}(f).$$

Через $(\cdot, \cdot)_h$ обозначим аппроксимацию скалярного произведения в $L_2(\Omega)$,

$$(u, v)_h = S_{\Omega}(uv).$$

Будем предполагать, что оно определяет скалярное произведение в V_h . Введем также следующие обозначения

$$\begin{aligned} (\nabla u, \nabla v)_h &= S_{\Omega}(\nabla u \cdot \nabla v), \\ a_h(u, \zeta) &= (\nabla u, \nabla \zeta)_h + (\varphi(u), \zeta)_h. \end{aligned} \quad (14)$$

Далее через u_{0h} и v_{0h} будем обозначать функции из V_h , которые являются некоторыми аппроксимациями функций u_0 и v_0 соответственно.

Определение 2. Функции u_h, v_h из $H^1(0, T; V_h)$, удовлетворяющие условиям

$$u_h - \gamma_I \in H^1(0, T; V_h^0), \quad u_h(0) = u_{0h}, \quad v_h(0) = v_{0h},$$

а также тождествам

$$\begin{aligned} \int_0^T (v_h'(t), \zeta(t))_h dt + \int_0^T a_h(u_h(t), \zeta(t)) dt &= \int_0^T (f(t), \zeta(t))_h dt, \\ \int_0^T (u_h'(t), \eta(t))_h dt &= \int_0^T (v_h(t), \eta(t))_h dt \end{aligned}$$

для всех $\zeta \in L_2(0, T; V_h^0)$, $\eta \in L_2(0, T; V_h)$, назовем приближенным решением задачи (5)–(6) по методу конечных элементов с численным интегрированием.

2.2. Полностью дискретная задача. Пусть $\tau > 0$. Определим на отрезке $[0, T]$ сетку узлов $\omega_{\tau} = \{t_j, j = 0, 1, \dots, M\}$ с шагами $\tau_j = t_j - t_{j-1}$, $\tau_j \leq \tau$, и фиксируем целое $m \geq 1$. Обозначим через $u_{h\tau}(t)$ непрерывную на $[0, T]$ функцию со значениями в V_h , которая является алгебраическим многочленом степени m на каждом отрезке $[t_{j-1}, t_j]$. Множество всех таких функций обозначим

через $S_m^1(0, T; V_h)$. Определим также пространство $S_{m-1}(0, T; V_h)$, состоящее из функций $\zeta : [0, T] \rightarrow V_h$, являющихся многочленами степени $m-1$ на каждом отрезке $[t_{j-1}, t_j]$. Функции из $S_{m-1}(0, T; V_h)$ не предполагаются непрерывными на всем $[0, T]$ (они могут терпеть разрыв в узлах сетки). Отметим, что кусочно-определенная производная $u'_{h\tau}$ принадлежит $S_{m-1}(0, T; V_h)$.

Полностью дискретную схему Петрова–Галеркина–МКЭ для задачи (5)–(6) определим следующим образом.

Определение 3. Найти такие функции $u_{h\tau}, v_{h\tau}$ из $S_m^1(0, T; V_h)$, что

$$u_{h\tau} - \gamma_{I\tau} \in S_m^1(0, T; V_h^0), \quad u_{h\tau}(0) = u_{0h}, \quad v_{h\tau}(0) = v_{0h},$$

которые удовлетворяют тождествам

$$\int_0^T (v'_{h\tau}(t), \zeta(t))_h dt + \int_0^T a_h(u_{h\tau}(t), \zeta(t)) dt = \int_0^T (f(t), \zeta(t))_h dt, \quad (15)$$

$$\int_0^T (u'_{h\tau}(t), \eta(t))_h dt = \int_0^T (v_{h\tau}(t), \eta(t))_h dt \quad (16)$$

для всех $\zeta \in S_{m-1}(0, T; V_h^0)$, $\eta \in S_{m-1}(0, T; V_h)$.

Отметим, что условие $u_{h\tau} - \gamma_{I\tau} \in S_m^1(0, T; V_h^0)$ равносильно условию $u_{h\tau}(a_i, t_j) = \gamma(a_i, t_j)$ для всех $i = n+1, \dots, N$, $j = 1, \dots, M$.

2.3. Сохранение энергии на дискретном уровне. Определим на пространстве V_h дискретные аналоги функционалов Π и E :

$$\Pi_h(u) = S_\Omega \left(\frac{1}{2} |\nabla u|^2 + \Phi(u) \right), \quad E_h(v, u) = \frac{1}{2} (v, v)_h + \Pi_h(u) - (f, u)_h.$$

Теорема 1. Пусть $f = f(x)$, $\gamma = \gamma(x)$, $u_{h\tau}, v_{h\tau}$ – решения схемы (15), (16). Тогда $E_h(v_{h\tau}(t), u_{h\tau}(t)) = E_h(v_{0h}, u_{0h})$ для всех $t \in \omega_\tau$.

Доказательство. Поскольку γ не зависит от t , то $\gamma_{I\tau}$ совпадает с γ_I и также не зависит от t . Поэтому $u'_{h\tau}(t) \in V_h^0$ для всех t . Это позволяет выбрать в (15) и (16) пробные функции равными

$$\zeta(t) = \begin{cases} u'_{h\tau}(t), & t \leq t_j, \\ 0, & t > t_j, \end{cases} \quad \eta(t) = \begin{cases} v'_{h\tau}(t), & t \leq t_j, \\ 0, & t > t_j, \end{cases}$$

где $j \geq 1$. Придем к следующим равенствам

$$\int_0^{t_j} (v'_{h\tau}(t), u'_{h\tau}(t))_h dt + \int_0^{t_j} a_h(u_{h\tau}(t), u'_{h\tau}(t)) dt = \int_0^{t_j} (f, u'_{h\tau}(t))_h dt,$$

$$\int_0^{t_j} (u'_{h\tau}(t), v'_{h\tau}(t))_h dt = \int_0^{t_j} (v_{h\tau}(t), v'_{h\tau}(t))_h dt,$$

из которых вытекает соотношение

$$\int_0^{t_j} (v_{h\tau}(t), v'_{h\tau}(t))_h dt + \int_0^{t_j} a_h(u_{h\tau}(t), u'_{h\tau}(t)) dt = \int_0^{t_j} (f, u'_{h\tau}(t))_h dt. \quad (17)$$

Преобразуем это равенство. Заметим, что $w(t)w'(t) = 1/2 d/dt w^2(t)$,

$$\nabla w(t) \cdot \nabla w'(t) = \frac{1}{2} \frac{d}{dt} |\nabla w(t)|^2, \quad \varphi(w(t)) w'(t) = \frac{d}{dt} \Phi(w(t)),$$

и, как следствие, для любых функций u и v справедливы следующие равенства

$$(v(t), v'(t))_h = 1/2 \, d/dt (v(t), v(t))_h,$$

$$a_h(u(t), u'(t)) = \frac{d}{dt} \Pi_h(u(t)), \quad (f, u'(t))_h = d/dt (f, u(t))_h.$$

Поэтому равенство (17) можно записать в следующем виде

$$\int_0^{t_j} \frac{d}{dt} E_h(v_{h\tau}(t), u_{h\tau}(t)) \, dt = 0.$$

Следовательно, $E_h(v_{h\tau}(t_j), u_{h\tau}(t_j)) = E_h(v_{0h}, u_{0h})$, $j = 1, \dots, M$. $\square$

3. Реализация простейшей двухслойной схемы

Рассмотрим реализацию определенной выше схемы в случае $m = 1$. Положим $u_h^j = u_{h\tau}(t_j)$, $u_h^j \in V_h$, $j = 0, 1, \dots, M$. Тогда справедлива формула

$$u_{h\tau}(t) = u_h^{j-1} + (u_h^j - u_h^{j-1}) \frac{t - t_{j-1}}{\tau_j}, \quad t \in [t_{j-1}, t_j].$$

Аналогичное представление имеет функция $v_{h\tau} \in S_m^1(0, T; V_h)$. Пусть в момент времени t_{j-1} решение схемы, а именно, пара функций u_h^{j-1} , v_h^{j-1} , известно. Это имеет место при $j = 1$, поскольку в силу начальных условий имеем $u_h^0 = u_{0h}$, $v_h^0 = v_{0h}$. Выберем в тождествах (15) и (16) функции $\zeta(t)$ и $\eta(t)$ равными нулю всюду, кроме отрезка $[t_{j-1}, t_j]$, на котором примем их равными соответственно произвольно фиксированному $\zeta_h \in V_h^0$ и $\eta_h \in V_h$. Тогда придем к следующим уравнениям

$$\int_{t_{j-1}}^{t_j} (v'_{h\tau}(t), \zeta_h)_h \, dt + \int_{t_{j-1}}^{t_j} a_h(u_{h\tau}(t), \zeta_h) \, dt = \int_{t_{j-1}}^{t_j} (f(t), \zeta_h)_h \, dt, \quad (18)$$

$$\int_{t_{j-1}}^{t_j} (u'_{h\tau}(t), \eta_h)_h \, dt = \int_{t_{j-1}}^{t_j} (v_{h\tau}(t), \eta_h)_h \, dt. \quad (19)$$

В силу линейности функции $t \rightarrow u_{h\tau}(t)$ на отрезке $[t_{j-1}, t_j]$ и определения (14) формы a_h имеем

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_j} \int_{t_{j-1}}^{t_j} a_h(u_{h\tau}(t), \zeta_h) \, dt &= \int_0^1 a_h(\sigma u_h^j + (1 - \sigma)u_h^{j-1}, \zeta_h) \, d\sigma = \\ &= \left(\nabla \frac{u_h^j + u_h^{j-1}}{2}, \nabla \zeta_h \right)_h + \left(\Phi[u_h^j, u_h^{j-1}], \zeta_h \right)_h, \end{aligned}$$

где в силу равенства $\varphi(s) = \Phi'(s)$

$$\Phi[u, v] = \int_0^1 \varphi(\sigma u + (1 - \sigma)v) \, d\sigma = \frac{\Phi(u) - \Phi(v)}{u - v}.$$

Вычислив остальные интегралы по переменной t в (18) и (19), придем к следующим уравнениям, справедливым для всех $j = 1, \dots, M$,

$$\left(\frac{v_h^j - v_h^{j-1}}{\tau_j}, \zeta_h \right)_h + \left(\nabla \bar{u}_h, \nabla \zeta_h \right)_h + \left(\Phi[u_h^j, u_h^{j-1}], \zeta_h \right)_h = (\bar{f}^j, \zeta_h)_h, \quad (20)$$

$$\left(\frac{u_h^j - u_h^{j-1}}{\tau_j}, \eta_h \right)_h = \left(\frac{v_h^j + v_h^{j-1}}{2}, \eta_h \right)_h. \quad (21)$$

Здесь использованы обозначения

$$\bar{u}_h = \frac{u_h^j + u_h^{j-1}}{2}, \quad \bar{f}^j = \frac{1}{\tau_j} \int_{t_{j-1}}^{t_j} f(t) dt. \quad (22)$$

В силу произвольности $\eta_h \in V_h$ из (21) следует

$$\frac{u_h^j - u_h^{j-1}}{\tau_j} = \frac{v_h^j + v_h^{j-1}}{2}. \quad (23)$$

Отсюда найдем v_h^j и из (22) u_h^j . Тогда уравнение (20) примет вид

$$\bar{\tau}^{-2} (\bar{u}_h, \zeta_h)_h + (\nabla \bar{u}_h, \nabla \zeta_h)_h + (\Phi[2\bar{u}_h - u_h^{j-1}, u_h^{j-1}], \zeta_h)_h = (\bar{f}, \zeta_h)_h, \quad (24)$$

где ζ_h – произвольная функция из V_h^0 ,

$$\bar{f} = \bar{f}^j + (u_h^{j-1} + \bar{\tau} v_h^{j-1})/\bar{\tau}^2, \quad \bar{\tau} = \tau_j/2.$$

Уравнение (24) сводится к системе (нелинейных) алгебраических уравнений. После его решения найдем $\bar{u}_h$, а потом определим $u_h^j = 2\bar{u}_h - u_h^{j-1}$ и v_h^j из (23).

3.1. Реализация схемы в случае линейных элементов. Уточним расчетные формулы, указанные выше, при использовании линейных конечных элементов, когда конечные элементы из T_h являются симплексами в R^d (отрезками – при $d = 1$, треугольниками – при $d = 2$, тетраэдрами – при $d = 3$), а функции из V_h на каждом конечном элементе K являются аффинными функциями, т. е. P_K в определении пространства конечных элементов V_h есть множество полиномов вида $a_0 + a_1 x_1 + \dots + a_d x_d$. Сетка узлов ω_h для указанных элементов совпадает с множеством всех вершин симплексов из T_h .

Напомним, что функция $v_h \in V_h$ имеет представление

$$v_h(x) = \sum_{i=1}^N v_i \varphi_i(x), \quad (25)$$

где $v_i = v_h(a_i)$, $i = 1, \dots, N$, – узловые параметры функции v_h .

Укажем подходящие для использования квадратурные формулы в одномерном и двумерном случаях. В одномерном случае, т. е. при $d = 1$, для вычисления интеграла на отдельном элементе можно использовать квадратуру либо трапеций, либо Симпсона. Эти же квадратуры, а также квадратуру центральных прямоугольников можно использовать для вычисления интеграла, определяющего $\bar{f}^j$. В двумерном случае, т. е. при $d = 2$, можно использовать квадратуру вида

$$\int_K f(x) dx \approx \frac{|K|}{3} (f(d_1^K) + f(d_2^K) + f(d_3^K)),$$

где $|K|$ – площадь $K \in T_h$, а узлы d_i^K совпадают либо с вершинами K , либо с серединами сторон K . Первая квадратура точна на многочленах первой степени, вторая – на многочленах второй степени. Легко убедиться в том, что в этих случаях билинейный функционал $(\cdot, \cdot)_h$ определяет скалярное произведение в V_h .

Реализация схемы, описанной в предыдущем пункте, требует определения функций u_{0h} и v_{0h} , а также решения уравнения (24). Рассмотрим эти этапы.

1) *Задание начальных значений u_{0h} и v_{0h} .* Укажем два способа. Для непрерывных функций u_0 и v_0 в качестве u_{0h} и v_{0h} можно выбрать их V_h -интерполанты, т. е. функции

$$u_{0h}(x) = \sum_{i=1}^N u_0(a_i) \varphi_i(x), \quad v_{0h}(x) = \sum_{i=1}^N v_0(a_i) \varphi_i(x).$$

В общем случае определим начальные значения как наилучшие приближения функций u_0 и v_0 в дискретном $L_2(\Omega)$, т. е. как решения уравнений

$$(u_{0h}, \zeta)_h = (u_0, \zeta)_h \quad \forall \zeta \in V_h, \quad (v_{0h}, \eta)_h = (v_0, \eta)_h \quad \forall \eta \in V_h. \quad (26)$$

Это равносильно решению двух систем алгебраических уравнений. В самом деле, выбрав $\zeta = \varphi_i$ в (26) и подставив разложение функции u_{0h} в первое равенство в (26), придем к системе уравнений

$$MU^0 = g^0, \quad M = \{(\varphi_j, \varphi_i)_h\}_{i,j=1}^N, \quad g^0 = \{(u_0, \varphi_i)_h\}_{i=1}^N$$

относительно вектора узловых параметров $U^0 = (u_{0h}(a_1), \dots, u_{0h}(a_N))^T$ функции u_{0h} . Если узлы квадратуры на конечном элементе совпадают с его вершинами, то матрица масс будет диагональной. Аналогичный вид имеет система уравнений для определения функции v_{0h} .

2) *Представление решений.* Рассмотрим теперь представления функций u_h^j , $j = 1, \dots, M$, а также пробных функций из V_h^0 в (20) и (21). Поскольку функции из V_h^0 равны нулю на границе Γ , то

$$\zeta_h(x) = \sum_{i=1}^n \zeta_i \varphi_i(x), \quad \forall \zeta_h \in V_h^0,$$

т. е. система функций $\{\varphi_i\}_{i=1}^n$ образует базис в V_h^0 .

Согласно определению 2.2. имеем $u_h^j|_{\Gamma} = \gamma_I(t_j)$, т. е. $u_h^j(a_i) = \gamma(a_i, t_j)$, $i = n+1, \dots, N$. Поэтому в силу (25) справедливо разложение

$$u_h^j(x) = \sum_{i=1}^n u_i^j \varphi_i(x) + \gamma_I^j(x), \quad \gamma_I^j(x) = \sum_{i=n+1}^N \gamma(a_i, t_j) \varphi_i(x).$$

Через $U^j = (u_1^j, \dots, u_n^j)^T$ обозначим неизвестные узловые параметры u_h^j .

3) *Вычисление решений на слое по времени.* Разложение $\bar{u}_h$ имеет вид

$$\bar{u}_h(x) = \sum_{k=1}^n \bar{u}_k \varphi_k(x) + \bar{\gamma}_I^j(x), \quad \bar{\gamma}_I^j = (\gamma_I^j + \gamma_I^{j-1})/2, \quad (27)$$

и пусть $\bar{U}_0 = (\bar{u}_1, \dots, \bar{u}_n)^T$ – вектор его неизвестных узловых параметров. Определим также вектор-функцию $\bar{F}_0 : R^n \rightarrow R^n$ с компонентами

$$\bar{F}_{0i}(U) = \left(\Phi \left[2 \sum_{k=1}^n U_k \varphi_k(x) + 2\bar{\gamma}_I^j(x) - u_h^{j-1}, u_h^{j-1} \right], \varphi_i \right)_h, \quad 1 \leq i \leq n.$$

Выбрав $\zeta_h = \varphi_i$, $i = 1, \dots, n$, и подставив разложение (27) в (24), придем к системе нелинейных алгебраических уравнений

$$\bar{\tau}^{-2} M_0 \bar{U}_0 + K_0 \bar{U}_0 + \bar{F}_0(\bar{U}_0) = \Psi_0. \quad (28)$$

Здесь индекс 0 указывает, что матрицы и векторы имеют длину n , M_0 и K_0 – подматрицы матрицы масс M и матрицы жесткости K соответственно,

$$M_0 = \{(\varphi_k, \varphi_i)_h\}_{i,k=1}^n, \quad K_0 = \{(\nabla \varphi_k, \nabla \varphi_i)_h\}_{i,k=1}^n, \\ \Psi_0 = \{(\bar{f}, \varphi_i)_h - \bar{\tau}^{-2} (\bar{\gamma}_I^j, \varphi_i)_h + (\nabla \bar{\gamma}_I^j, \nabla \varphi_i)_h\}_{i=1}^n.$$

Сделаем следующие замечания.

а) Матрицы M и K стандартной процедурой сборки матриц, принятой в МКЭ, вычисляются лишь один раз в самом начале вычислений.

б) Вектор Ψ_0 можно вычислить следующим образом. Сначала стандартной процедурой сборки, принятой в МКЭ, вычислим вектор $g = \{(\bar{f}, \varphi_i)_h\}_{i=1}^N$. Затем определим нулевой вектор-столбец q длины N и его i -й элемент, $i = n+1, \dots, N$, положим равным $(\gamma(a_i, t_j) + \gamma(a_i, t_{j-1}))/2$; наконец, вычислим вектор $\Psi_0 = g - \bar{\tau}^{-2} Mq - Kq$.

с) Для вычисления вектора $\bar{F}_0(U)$ при заданном $U = (U_1, \dots, U_n)^T$ сначала вычислим функцию (точнее, ее узловые параметры)

$$u_h(x) = 2 \sum_{k=1}^n U_k \varphi_k(x) + 2\bar{\gamma}_I^j(x) - u_h^{j-1}.$$

Поскольку $\Phi[u, v] = (\Phi(u) - \Phi(v))/(u - v)$, то вектор $\bar{F}_0(U)$ с компонентами

$$\bar{F}_{0i}(U) = (g, \varphi_i)_h, \quad 1 \leq i \leq n, \quad g = \frac{\Phi(u_h) - \Phi(u_h^{j-1})}{u_h - u_h^{j-1}}$$

можно вычислить стандартной процедурой сборки, принятой в МКЭ.

4. Вычислительные эксперименты

В этом разделе мы представляем некоторые результаты вычислений по построенной нами двухслойной схеме для одномерных и двумерных уравнений Клейна–Гордона с известными точными решениями. Вычисления были организованы с целью определения максимального порядка точности схемы на гладких решениях в различных нормах. Для каждой тестовой задачи вычисления были организованы следующим образом.

1. При $d = 1$ отрезок Ω был разбит на n конечных элементов (подотрезков) равной длины h . В двумерном случае разбиение квадратной области Ω на треугольные конечные элементы было получено на основе равномерной ортогональной сетки из $(n+1) \times (n+1)$ узлов после деления одним и тем же способом каждого элементарного квадрата со стороной h на два треугольника. Для вычисления интегралов при реализации схемы МКЭ использовались квадратурные формулы, обеспечивающие диагональность матрицы масс.

2. Функции в начальных условиях дискретной схемы выбирались равными V_h -интерполантам u_0 и V_0 . Для решения системы нелинейных алгебраических уравнений (28) на каждом слое времени был использован итерационный метод Ньютона с начальным приближением с предыдущего слоя. Во всех рассмотренных случаях метод сходиллся квадратично. Итерации завершались следующим образом: после того как равномерная норма разности соседних итераций становилась меньше 10^{-8} , выполнялась еще одна итерация. При таком условии итерационный метод не оказывал влияния на погрешность схемы.

3. Приближенный метод зависит от двух параметров h и τ . Учитывая приближения, использованные при построении схемы, естественно ожидать, что погрешность решения в среднеквадратичной норме имеет второй порядок малости как по h , так и по τ , т. е. справедлива оценка

$$L(u) = \|u - u_{h\tau}\|_{L_2(Q)} \leq C(h^2 + \tau^2). \quad (29)$$

Для экспериментальной проверки этой оценки были проведены следующие вычисления.

Для набора точек сетки $n = n_1, n_2, \dots$ (в одном направлении) и соответствующих им шагов сетки $h = h_1, h_2, \dots$ при $\tau = Th$ были найдены приближенные решения задачи с известным точным решением и вычислены величины $L(u)$ и $L(v)$. Одновременно вычислялись погрешности $C(u)$ и $C(v)$, где

$$C(u) = \max_{1 \leq i \leq N} \max_{1 \leq j \leq M} |u(a_i, t_j) - u_{h\tau}(a_i, t_j)|. \quad (30)$$

Для вычисления интегралов в определениях $L(u)$ и $L(v)$ использовалась составная квадратурная формула Симпсона. Предположив, что $E_h \approx Ch^\alpha$, где E_h — любая из указанных выше норм, и что постоянная C слабо зависит от h , нашли значения α_i по формуле

$$\alpha_i = \log(E_{h_{i+1}}/E_{h_i}) / \log(h_{i+1}/h_i).$$

Отметим, что значения $\alpha_i \approx 2$ соответствуют ожидаемому значению $\alpha = 2$.

4. Вычислениями было подтверждено, что предложенная схема сохраняет полную энергию (с точностью до ошибок округления). Как в одномерном, так и двумерном случаях был решен ряд задач при различных шагах сетки с исходными данными, удовлетворяющими условиям теоремы 1. По найденным решениям была вычислена вариация функционала энергии

$$\Delta E = \max_{t \in \omega_\tau} E_h(v_{h\tau}(t), u_{h\tau}(t)) - \min_{t \in \omega_\tau} E_h(v_{h\tau}(t), u_{h\tau}(t)).$$

Во всех случаях она имела порядок $10^{-16} \sim 10^{-13}$ в зависимости от шага h , что свидетельствует о постоянности функционала энергии.

4.1. Решение одномерных задач. Приведем решения двух тестовых задач.

Тест 1. Рассмотрим одномерное уравнение Клейна–Гордона (1) на отрезке $[-10, 10]$ при $T = 20$ с начальными условиями

$$u(x, 0) = 0, \quad u'(x, 0) = 4 \operatorname{sech}(x)$$

при $\varphi(u) = \sin u$, имеющее точное решение [15]

$$u(x, t) = 4 \operatorname{arctg}(\operatorname{sech}(x)t).$$

На рис. 1 представлен график приближенного решения и его погрешности на грубой сетке узлов. В таблице 1 указана зависимость от h норм погрешности (29), (30), а также соответствующих им значений α , при $\tau = h$.

Тест 2. Рассмотрим при $d = 1$ уравнение Клейна–Гордона (1) на отрезке $[-15, 45]$ при $\varphi(u) = -u + u^3$ и $T = 60$, имеющее точное решение

$$u(x, t) = \operatorname{tgh}((x - ct)/d), \quad c = 0.5, \quad d = \sqrt{2(1 - c^2)}.$$

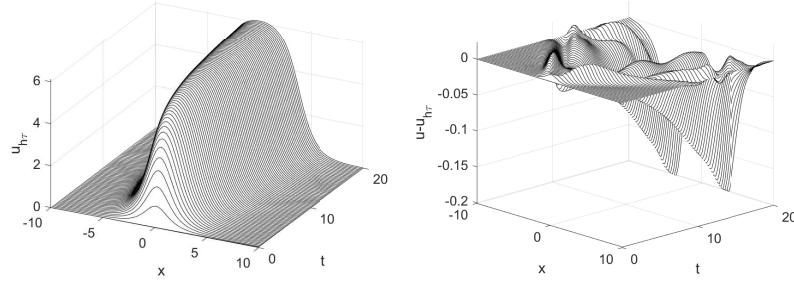


Рис. 1. Тест 1: приближенное решение (слева) и его погрешность на сетке узлов с шагами $h = 0.25$, $\tau = 0.25$

Табл. 1

Нормы погрешности и порядки сходимости решения теста 1 при $\tau = h$

h	$L(u)$	$\alpha_{L(u)}$	$L(v)$	$\alpha_{L(v)}$	$C(u)$	$\alpha_{C(u)}$	$C(v)$	$\alpha_{C(v)}$
1/100	5.53 e-1	—	1.22 e-1	—	1.33 e-1	—	2.29 e-2	—
1/200	1.45 e-1	1.93	3.17 e-2	1.95	3.54 e-2	1.91	6.13 e-3	1.90
1/400	3.67 e-2	1.98	7.98 e-3	1.99	8.97 e-3	1.98	1.58 e-3	1.96
1/600	1.64 e-2	1.99	3.55 e-3	2.00	3.99 e-3	1.99	6.97 e-4	2.01
1/800	9.20 e-3	2.00	2.00 e-3	2.00	2.25 e-3	2.00	3.98 e-4	2.01
1/1000	5.89 e-3	2.00	1.28 e-3	2.00	1.44 e-3	2.00	2.50 e-4	2.00

Табл. 2

Нормы погрешности и порядки сходимости решения теста 2 при $\tau = h$

h	$L(u)$	$\alpha_{L(u)}$	$L(v)$	$\alpha_{L(v)}$	$C(u)$	$\alpha_{C(u)}$	$C(v)$	$\alpha_{C(v)}$
1/100	6.31 e+0	—	2.15 e+0	—	1.05 e+0	—	3.05 e-1	—
1/200	1.30 e+0	2.28	4.79 e-1	2.17	2.28 e-1	2.21	7.88 e-2	1.95
1/400	3.18 e-1	2.03	1.17 e-1	2.03	5.55 e-2	2.04	1.86 e-2	2.08
1/600	1.41 e-1	2.01	5.19 e-2	2.01	2.46 e-2	2.01	8.17 e-3	2.03
1/800	7.90 e-2	2.00	2.92 e-2	2.00	1.38 e-2	2.01	4.63 e-3	1.98
1/1000	5.05 e-2	2.00	1.87 e-2	2.00	8.83 e-3	2.00	2.97 e-3	1.98

В таблице 2 указана зависимость от h норм погрешности (29), (30), а также соответствующих им значений α при $\tau = h$.

Тест 3. Рассмотрим при $d = 2$ уравнение Клейна–Гордона (1) на отрезке $[-7, 7]$ при $\varphi(u) = \sin u$ и $T = 7$, имеющее точное решение

$$u(x, t) = 4 \operatorname{atan}(\exp(x + y - t)).$$

На рис. 2 представлен график приближенного решения и его погрешности на грубой сетке узлов. В таблице 3 указана зависимость от h норм погрешности (29), (30), а также соответствующих им значений α при $\tau = h$.

Тест 4. Рассмотрим при $d = 2$ уравнение Клейна–Гордона (1) на отрезке $[-10, 10]$ при $\varphi(u) = -u + u^3$ и $T = 10$, имеющее точное решение [16]

$$u(x, t) = \operatorname{tgh}((x - ct)/d), \quad c = 0.5, \quad d = \sqrt{2(2 - c^2)}.$$

В таблице 4 указана зависимость от h норм погрешности (29), (30), а также соответствующих им значений α при $\tau = h$.

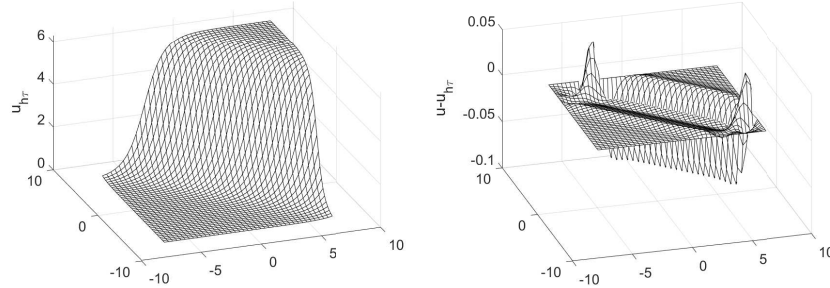


Рис. 2. Тест 3: приближенное решение (слева) и его погрешность на грубой сетке узлов с шагами $h = 0.35$, $\tau = h/2$

Табл. 3

Нормы погрешности и порядки сходимости решения теста 3 при $\tau = h/2$

h	$L(u)$	$\alpha_{L(u)}$	$L(v)$	$\alpha_{L(v)}$	$C(u)$	$\alpha_{C(u)}$	$C(v)$	$\alpha_{C(v)}$
1/40	7.58 e-01	—	7.47 e-01	—	1.18 e-01	—	1.85 e-01	—
1/80	1.84 e-01	2.05	1.82 e-01	2.03	2.89 e-02	2.03	3.92 e-02	2.24
1/100	1.17 e-01	2.02	1.17 e-01	2.01	1.84 e-02	2.02	2.48 e-02	2.05
1/140	5.95 e-02	2.01	5.94 e-02	2.00	9.39 e-03	2.00	1.26 e-02	2.01

Табл. 4

Нормы погрешности и порядки сходимости решения теста 4 при $\tau = h/2$

h	$L(u)$	$\alpha_{L(u)}$	$L(v)$	$\alpha_{L(v)}$	$C(u)$	$\alpha_{C(u)}$	$C(v)$	$\alpha_{C(v)}$
1/40	3.36 e-1	—	1.70 e-1	—	2.41 e-2	—	1.33 e-2	—
1/80	8.34 e-2	2.01	4.32 e-2	1.98	5.84 e-3	2.05	3.41 e-3	1.96
1/100	5.34 e-2	2.00	2.77 e-2	1.99	3.73 e-3	2.01	2.20 e-3	1.97
1/140	2.72 e-2	2.00	1.42 e-2	1.99	1.90 e-3	2.01	1.13 e-3	1.97

Из результатов вычислений, представленных в таблицах 1–4, следует, что предложенная в работе двухслойная схема позволяет определить как решение задачи u , так и его производную по времени $v = u'$ с погрешностью порядка $O(h^2 + \tau^2)$ в среднеквадратической норме $L_2(Q)$.

Заключение

Предложено семейство сеточных схем Петрова–Галеркина на основе метода конечных элементов для решения нелинейного уравнения Клейна–Гордона. Дискретные схемы определены в терминах решения задачи и его производной по переменной времени. Показано, что они обеспечивают сохранение полной энергии на дискретном уровне. Проведено численное исследование простейшей двухслойной схемы подобного типа на основе линейных треугольных конечных элементов. Численным решением ряда тестовых задач, имеющих гладкие решения, показано, что она позволяет определить как решение задачи, так и его производную по времени с погрешностью порядка $O(h^2 + \tau^2)$ в среднеквадратической норм.

Литература

1. Додд Р., Эйлбек Дж., Гиббон Дж., Моррис Х.М. Солитоны и нелинейные волновые уравнения. М.: Мир, 1988. 694 с.
2. Браун О.М., Кившарь Ю.С. Модель Френкеля-Конторовой: Концепции, методы, приложения. М.: Физматлит, 2008. 519 с.
3. Bratsos A.G. A modified predictor-corrector scheme for the two-dimensional sine-Gordon equation // Numer. Algorithms. 2006. V. 43, No 4. P. 295–308. <https://doi.org/10.1007/s11075-006-9061-3>.
4. Bratsos A.G. The solution of the two-dimensional sine-Gordon equation using the method of lines // J. Comput. Appl. Math. 2007. V. 206, No 1. P. 251–277. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2006.07.002>.
5. Bao W., Dong X. Analysis and comparison of numerical methods for the Klein–Gordon equation in the nonrelativistic limit regime // Numer. Math. 2012. V. 120, No 2. P. 189–229. <https://doi.org/10.1007/s00211-011-0411-2>.
6. Wang L., Chen W., Wang C. An energy-conserving second order numerical scheme for nonlinear hyperbolic equation with an exponential nonlinear term // J. Comput. Appl. Math. 2015. V. 280. P. 347–366. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2014.11.043>.
7. Kang X., Feng W., Cheng K., Guo C. An efficient finite difference scheme for the 2d sine-Gordon equation // J. Nonlinear Sci. Appl. 2017. V. 10, No 6. P. 2998–3012. <http://dx.doi.org/10.22436/jnsa.010.06.14>.
8. Argyris J., Haase M., Heinrich J.C. Finite element approximation to two dimensional sine-Gordon solitons // Comput. Methods Appl. Mech. Eng. 1991. V. 86, No 1. P. 1–26. [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(91\)90136-T](https://doi.org/10.1016/0045-7825(91)90136-T).
9. Wang Q., Cheng D. Numerical solution of damped nonlinear Klein–Gordon equations using variational method and finite element approach // Appl. Math. Comput. 2005. V. 162, No 1. P. 381–401. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2003.12.102>.
10. Asgari Z., Hosseini S.M. Numerical solution of two-dimensional sine-Gordon and MBE models using Fourier spectral and high order explicit time stepping methods // Comput. Phys. Commun. 2013. V. 184, No 3. P. 565–572. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2012.10.009>.
11. Jiware R., Pandit S., Mittal R.C. Numerical simulation of two-dimensional sine-Gordon solitons by differential quadrature method // Comput. Phys. Commun. 2012. V. 183, No 3. P. 600–616. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2011.12.004>.
12. Dehghan M., Shokri A. Numerical method for solution of the two-dimensional sine-Gordon equation using the radial basis functions // Math. Comput. Simul. 2008. V. 79, No 3. P. 700–715. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2008.04.018>.
13. Browder F.E. On non-linear wave equations // Math. Z. 1962. V. 80, No 3. P. 249–264.
14. Луонс Ж.Л. Некоторые методы решения нелинейных краевых задач. М: Мир, 1972. 587 с.
15. Dehghan M., Mirzaei D. The boundary integral equation approach for numerical solution of the one-dimensional sine-Gordon equation // Numer. Methods Partial Differ. Equations. 2008. V. 24, No 6. P. 1405–1415. <https://doi.org/10.1002/num.20325>.
16. Khan K., Akbar M.A. Exact solutions of the (2+1)-dimensional cubic Klein–Gordon equation and the (3+1)-dimensional Zakharov–Kuznetsov equation using the modified simple equation method // J. Assoc. Arab Univ. Basic Appl. Sci. 2014. V. 15, No 1. P. 74–81. <https://doi.org/10.1016/j.jaubas.2013.05.001>.

Поступила в редакцию 10.07.2023

Принята к публикации 04.09.2023

Даутов Рафаил Замилович, доктор физико-математических наук, профессор
Институт вычислительной математики и информационных технологий, Казанский
(Приволжский) федеральный университет
ул. Кремлевская, д. 18, г. Казань, 420008, Россия
E-mail: rafail.dautov@gmail.com

Салимзянова Гулина Ринатовна, студентка 2 курса магистратуры
Институт вычислительной математики и информационных технологий, Казанский
(Приволжский) федеральный университет
ул. Кремлевская, д. 18, г. Казань, 420008, Россия
E-mail: gulina12012000@mail.ru

ISSN 2541–7746 (Print)

ISSN 2500–2198 (Online)

UCHENYE ZAPISKI KAZANSKOGO UNIVERSITETA.
SERIYA FIZIKO-MATEMATICHESKIE NAUKI
(Proceedings of Kazan University. Physics and Mathematics Series)

2023, vol. 165, no. 3, pp. 190–207

ORIGINAL ARTICLE

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.190-207

A Conservative Fully Discrete Finite Element Scheme for the Nonlinear Klein–Gordon Equation

*R.Z. Dautov**, *G.R. Salimzyanova***

Kazan Federal University, Kazan, 420008 Russia

E-mail: **rafail.dautov@gmail.com*, ***gulina12012000@mail.ru*

Received July 10, 2023; Accepted September 04, 2023

Abstract

This article proposes a family of the Petrov–Galerkin–FEM methods that can be used to solve the nonlinear Klein–Gordon equation. The discrete schemes were formulated based on the solution of the problem and its time derivative. They ensure that the total energy is conserved at a discrete level. The simplest two-layer scheme was studied numerically. Based on the solution of the test problems with smooth solutions, it was shown that the scheme can determine the solution of the problem, as well as its time derivative with an error of the order of $O(h^2 + \tau^2)$ in the continuous L_2 norm, where τ and h characterize the grid steps in time and space, respectively.

Keywords: Petrov–Galerkin method, finite element method, Klein–Gordon equation, implicit scheme

Figure Captions

Fig. 1. Test 1: approximate solution (on the left) and its error on the grid of nodes with steps $h = 0.25$, $\tau = 0.25$.

Fig. 2. Test 3: approximate solution (on the left) and its error on the coarse grid of nodes with steps $h = 0.35$, $\tau = h/2$.

References

1. Dodd R., Eilbeck J., Gibbon J., Morris H.M. *Solitony i nelineinye volnovye uravneniya* [Solitons and Nonlinear Wave Equations]. Moscow, Mir, 1988. 694 p. (In Russian)
2. Braun O.M., Kivshar Yu.S. *Frenkel-Kontorova Model: Concepts, Methods, Applications*. Ser.: Theoretical and mathematical physics. Berlin, Heidelberg, Springer. xviii, 472 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-662-10331-9>.
3. Bratsos A.G. A modified predictor-corrector scheme for the two-dimensional sine-Gordon equation. *Numer. Algorithms*, 2006, vol. 43, no. 4, pp. 295–308. <https://doi.org/10.1007/s11075-006-9061-3>.
4. Bratsos A.G. The solution of the two-dimensional sine-Gordon equation using the method of lines. *J. Comput. Appl. Math.*, 2007, vol. 206, no. 1, pp. 251–277. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2006.07.002>.
5. Bao W., Dong X. Analysis and comparison of numerical methods for the Klein–Gordon equation in the nonrelativistic limit regime. *Numer. Math.*, 2012, vol. 120, no. 2, pp. 189–229. <https://doi.org/10.1007/s00211-011-0411-2>.
6. Wang L., Chen W., Wang C. An energy-conserving second order numerical scheme for nonlinear hyperbolic equation with an exponential nonlinear term. *J. Comput. Appl. Math.*, 2015, vol. 280, pp. 347–366. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2014.11.043>.
7. Kang X., Feng W., Cheng K., Guo C. An efficient finite difference scheme for the 2d sine-Gordon equation. *J. Nonlinear Sci. Appl.*, 2017, vol. 10, no. 6, pp. 2998–3012. <http://dx.doi.org/10.22436/jnsa.010.06.14>.
8. Argyris J., Haase M., Heinrich J.C. Finite element approximation to two dimensional sine-Gordon solitons. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, 1991, vol. 86, no. 1, pp. 1–26. [https://doi.org/10.1016/0045-7825\(91\)90136-T](https://doi.org/10.1016/0045-7825(91)90136-T).
9. Wang Q., Cheng D. Numerical solution of damped nonlinear Klein–Gordon equations using variational method and finite element approach. *Appl. Math. Comput.*, 2005, vol. 162, no. 1, pp. 381–401. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2003.12.102>.
10. Asgari Z., Hosseini S.M. Numerical solution of two-dimensional sine-Gordon and MBE models using Fourier spectral and high order explicit time stepping methods. *Comput. Phys. Commun.*, 2013, vol. 184, no. 3, pp. 565–572. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2012.10.009>.
11. Jiware R., Pandit S., Mittal R.C. Numerical simulation of two-dimensional sine-Gordon solitons by differential quadrature method. *Comput. Phys. Commun.*, 2012, vol. 183, no. 3, pp. 600–616. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2011.12.004>.
12. Dehghan M., Shokri A. Numerical method for solution of the two-dimensional sine-Gordon equation using the radial basis functions. *Math. Comput. Simul.*, 2008, vol. 79, no. 3, pp. 700–715. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2008.04.018>.
13. Browder F.E. On non-linear wave equations. *Math. Z.*, 1962, vol. 80, no. 3, pp. 249–264.
14. Lions J.L. *Nekotorye metody resheniya nelineinykh kraevykh zadach* [Some Methods for Solving Non-Linear Boundary Value Problems]. Moscow, Mir, 1972. 587 p. (In Russian)
15. Dehghan M., Shokri A. Numerical method for solution of the two-dimensional sine-Gordon equation using the radial basis functions. *Math. Comput. Simul.*, 2008, vol. 79, no. 3, pp. 700–715. <https://doi.org/10.1016/j.matcom.2008.04.018>.

16. Khan K., Akbar M.A. Exact solutions of the (2+1)-dimensional cubic Klein–Gordon equation and the (3+1)-dimensional Zakharov–Kuznetsov equation using the modified simple equation method. *J. Assoc. Arab Univ. Basic Appl. Sci.*, 2014, vol. 15, no. 1, pp. 74–81. <https://doi.org/10.1016/j.jaubas.2013.05.001>.

Для цитирования: Даутов Р.З., Салимзянова Г.Р. Консервативная полностью дискретная схема МКЭ для нелинейного уравнения Клейна–Гордона // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. 2023. Т. 165, кн. 3. С. 190–207. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.190-207>.

For citation: Dautov R.Z., Salimzyanova G.R. A conservative fully discrete finite element scheme for the nonlinear Klein–Gordon equation. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2023, vol. 165, no. 3, pp. 190–207. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.190-207>. (In Russian)

ОРИГИНАЛЬНАЯ СТАТЬЯ

УДК 519

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.208-218

**ВАРИАНТ МЕТОДА ОТСЕЧЕНИЙ С ВНУТРЕННИМИ
ИТЕРАЦИОННЫМИ ТОЧКАМИ ДЛЯ ЗАДАЧИ
ВЫПУКЛОГО ПРОГРАММИРОВАНИЯ ОБЩЕГО ВИДА**

И. Я. Заботин, К. Е. Казаева, О. Н. Шульгина

Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, 420008, Россия

Аннотация

Предложен метод решения задачи выпуклого программирования, относящийся к классу методов отсечений. Итерационные точки вычисляются в нём на основе аппроксимации многогранными множествами как области ограничений, так и надграфика целевой функции исходной задачи. Метод характерен, в частности, тем, что основная последовательность приближений строится принадлежащей допустимой области и на каждом шаге метода есть возможность оценивать близость текущего значения функции к её оптимальному значению. Доказана сходимость метода, описаны некоторые его реализации.

Ключевые слова: выпуклое программирование, условная минимизация, оптимальное значение, аппроксимация множества, надграфик функции, итерационная точка, последовательность приближений, отсекающая гиперплоскость, сходимость

Введение

Большинство методов отсечений для решения задач выпуклого программирования основано на аппроксимации многогранными множествами либо области ограничений задачи, либо надграфика функции цели (например, [1–7]). В связи с этим их применение на практике удобно далеко не всегда. Такие методы используются в тех случаях, когда в исходной задаче или допустимое множество является многогранником, или целевая функция линейна.

Однако есть группа методов отсечений, которые применимы для решения задач выпуклого программирования общего вида (например, [8–11]). В этих методах для построения приближений используется операция погружения в многогранные множества одновременно и области ограничений, и надграфика целевой функции. Поэтому, несмотря на общий вид исходной задачи, итерационные точки в таких методах отыскиваются путём решения вспомогательных задач линейного программирования. Предложенный здесь метод принадлежит именно к этой группе методов отсечений. Опишем кратко его основные особенности.

В методах [1, 3, 9, 11] для построения текущих гиперплоскостей используется заданная на предварительном шаге вспомогательная внутренняя точка надграфика. Численные исследования этих методов показали, что упомянутую вспомогательную точку целесообразно периодически изменять внутри надграфика, приближая её вместе с итерационными точками к решению задачи. В связи с этим в предлагаемом методе предусмотрена возможность изменения вспомогательных точек от шага к шагу.

Вычислительные эксперименты с методами [9–11] показали также следующее. Скорость решения задачи часто увеличивается, если на определённых итерациях строить отсекающие плоскости с использованием не одной точки, а одновременно двух – внутренней и внешней по отношению к допустимому множеству. В предложенном ниже методе заложен один такой способ построения отсечений. А именно, если вспомогательная точка, найденная на текущем шаге, не принадлежит допустимому множеству, то отсечения строятся на основе этой точки и некоторой соответствующей ей точки из области ограничений.

Отметим также, что основная последовательность приближений, строящаяся согласно предлагаемому методу, принадлежит множеству ограничений, что удобно с практической точки зрения. Кроме того, учитывая способ построения вспомогательных точек, на каждой итерации метода можно оценивать близость текущего значения целевой функции к её оптимальному значению. Это обстоятельство позволяет зафиксировать получение решения задачи на некотором шаге $\mathcal{E}$.

1. Постановка задачи

Решим задачу

$$\min \{f(x) : x \in D\}, \quad (1)$$

где $f(x)$ – выпуклая функция, определённая в n -мерном евклидовом пространстве R_n и принимающая в каждой точке $x \in R_n$ конечное значение, а $D \subset R_n$ – выпуклое ограниченное замкнутое множество с непустой внутренностью $\text{int } D$.

Положим

$$f^* = \min \{f(x) : x \in D\}, \quad X^* = \{x \in D : f(x) = f^*\},$$

$$\text{epi}(f, G) = \{u = (x, \gamma) \in R_{n+1} : x \in G, \gamma \geq f(x)\},$$

где

$$G \subset R_n, \quad f_\delta(x) = f(x) + \delta, \quad \delta \geq 0, \quad A(z, G) = \{a \in R_n : \|a\| = 1, \langle a, x - z \rangle \leq 0 \quad \forall x \in G\},$$

$$B(z', Q) = \{b \in R_{n+1} : \|b\| = 1, \langle b, u - z' \rangle \leq 0 \quad \forall u \in Q\}$$

– множества нормированных обобщённо-опорных векторов для множества G в точке $z \in R_n$ и множества $Q \subset R_{n+1}$ в точке $z' \in R_{n+1}$ соответственно, $K = \{0, 1, \dots\}$.

2. Метод отсечений и его обсуждение

Предлагаемый метод решения задачи (1) вырабатывает последовательность приближений $x_k, k \in K$, следующим образом.

Строится выпуклое ограниченное замкнутое множество $G_0 \subset R_n$ и выпуклое замкнутое множество $M_0 \subset R_{n+1}$ такие, что

$$D \subset G_0, \quad \text{epi}(f, R_n) \subset M_0.$$

Задаются числа $\delta, q, q', q'', \alpha$, удовлетворяющие условиям

$$\delta > 0, \quad 1 \leq q, q', q'' < +\infty, \quad \alpha \leq \min \{f(x) : x \in G_0\}.$$

Выбираются точки

$$v \in \text{int } D, \quad v'_0, v''_0 \in \text{epi}(f_\delta, R_n).$$

Полагается $k = 0$.

1. Находится решение (y_k, γ_k) , где $y_k \in R_n, \gamma_k \in R_1$, следующей задачи:

$$\begin{aligned} \gamma - \min, \\ (x, \gamma) \in M_k, \quad x \in G_k, \quad \gamma \geq \alpha. \end{aligned} \quad (2)$$

Если

$$y_k \in D, \quad f(y_k) = \gamma_k, \quad (3)$$

то $y_k \in X^*$, и процесс построения итерационных точек заканчивается.

2. Строится приближение x_k следующим образом. Если $y_k \notin D$, то полагается

$$x_k = y_k + q_k(z_k - y_k), \quad (4)$$

где $z_k = \lambda_k v + (1 - \lambda_k)y_k$, а числа $\lambda_k \in (0, 1), q_k \in [1, q]$ выбраны так, что

$$z_k \notin \text{int } D, \quad x_k \in D.$$

В противном случае полагается $x_k = y_k, z_k = y_k$. Если

$$f(x_k) = \gamma_k, \quad (5)$$

то x_k – решение задачи (1), и процесс заканчивается.

3. Строится множество $G_{k+1} \in R_n$ следующим образом. Если $y_k \notin D$, то выбирается конечное множество $A_k \subset A(z_k, D)$ и полагается

$$G_{k+1} = G_k \cap P_k, \quad (6)$$

где $P_k = \{x \in R_n : \langle a, x - z_k \rangle \leq 0 \quad \forall a \in A_k\}$. В противном случае

$$G_{k+1} = G_k. \quad (7)$$

4. Полагается

$$w_k = (y_k, \gamma_k), \quad u_k = (x_k, \sigma_k),$$

где $\sigma_k \in R_1$ такое, что

$$\sigma_k \leq f(x_k), \quad u_k \in M_k. \quad (8)$$

5. Выбираются точки

$$z'_k = \lambda'_k v'_k + (1 - \lambda'_k)w_k, \quad z''_k = \lambda''_k v''_k + (1 - \lambda''_k)u_k,$$

где $\lambda'_k, \lambda''_k \in [0, 1)$, так, чтобы $z'_k, z''_k \notin \text{int epi}(f, R_n)$ и при некоторых $q'_k \in [1, q'], q''_k \in [1, q'']$ для точек

$$r'_k = w_k + q'_k(z'_k - w_k), \quad r''_k = u_k + q''_k(z''_k - u_k)$$

выполнялись включения

$$r'_k, r''_k \in \text{epi}(f, R_n).$$

6. Выбираются конечные множества $B'_k \subset B(z'_k, \text{epi}(f, R_n))$, $B''_k \subset B(z''_k, \text{epi}(f, R_n))$ и полагается $T'_k = \{u \in R_{n+1} : \langle b, u - z'_k \rangle \leq 0 \quad \forall b \in B'_k\}$, $T''_k = \{u \in R_{n+1} : \langle b, u - z''_k \rangle \leq 0 \quad \forall b \in B''_k\}$,

$$M_{k+1} = M_k \cap T'_k \cap T''_k. \quad (9)$$

7. Выбираются точки $v'_{k+1}, v''_{k+1} \in \text{epi}(f_\delta, R_n)$, значение k увеличивается на единицу, и следует переход к п. 1.

Докажем, прежде всего, разрешимость задачи (2) для всех $k \in K$ и критерий оптимальности, заложенные в пп. 1, 2 метода. Пусть $x^* \in X^*$.

Лемма 1. Для всех $k \in K$ точка $(x^*, f^*) \in R_{n+1}$ удовлетворяет ограничениям задачи (2).

Доказательство. Покажем сначала, что при всех $k \in K$ верны включения

$$x \in G_k, \text{epi}(f, R_n) \subset M_k. \quad (10)$$

При $k = 0$ включения (10) справедливы согласно условиям выбора множеств G_0, M_0 на предварительном шаге метода. Допустим теперь, что (10) выполняется при $k = l \geq 0$. Покажем, что

$$x^* \in G_{l+1}, \quad (11)$$

$$\text{epi}(f, R_n) \subset M_{l+1}, \quad (12)$$

тогда соотношения (10) будут доказаны для всех $k \in K$.

Согласно (6), (7) $G_{l+1} = G_l$ или $G_{l+1} = G_l \cap P_l$. В первом случае включение (11) сразу доказано ввиду сделанного индукционного предположения о том, что $x^* \in G_l$. Во втором случае (11) справедливо в силу того же предположения, а также включения $x^* \in P_l$, которое выполняется за счёт выбора точки z_l и множества A_l обобщенно-опорных в точке z_l к множеству D векторов. Далее, по условию $\text{epi}(f, R_n) \subset M_l$, и, кроме того, $\text{epi}(f, R_n) \subset T'_l \cap T''_l$ согласно выбору точек z'_l, z''_l и множеств B'_l, B''_l . Значит, в силу (9) включение (12) также имеет место, и утверждение (10) доказано.

Наконец, в силу выбора числа α и множества G_0 справедливо неравенство $f^* \geq \alpha$. Отсюда с учётом (10) и включения $(x^*, f(x^*)) \in \text{epi}(f, R_n)$ следует утверждение леммы. $\square$

Леммой 1 обоснована разрешимость задачи (2). Докажем теперь критерии оптимальности.

Лемма 2. Для решения (y_k, γ_k) , $k \in K$, задачи (2) имеет место неравенство

$$\gamma_k \leq f^*. \quad (13)$$

Доказательство утверждения следует из леммы 1, поскольку для любой точки (x, γ) , удовлетворяющей ограничениям задачи (2), и для решения (x_k, γ_k) этой задачи справедливо неравенство $\gamma_k \leq \gamma$.

Теорема 1. Пусть точка $\tilde{x} \in D$ такая, что при некотором $k \in K$ выполняется равенство $f(\tilde{x}) = \gamma_k$. Тогда $\tilde{x} \in X^*$.

Доказательство. В силу (13) $f(\tilde{x}) \leq f^*$. С другой стороны, $f(\tilde{x}) \geq f^*$ согласно включению $\tilde{x} \in D$. Таким образом, $f(\tilde{x}) = f^*$, и теорема доказана. $\square$

Следствие. Если при некотором $k \in K$ для точки (y_k, γ_k) выполняются соотношения (3), то $y_k \in X^*$. Если при некотором $k \in K$ выполняется равенство (5), то $x_k \in X^*$.

Доказательство сформулированных утверждений непосредственно следует из теоремы 1.

Прежде чем обосновывать сходимость метода, приведём некоторые замечания, касающиеся его реализаций.

Замечание 1. Множество M_0 на предварительном шаге метода можно выбирать совпадающим с R_{n+1} . Этим объясняется включение неравенства $\gamma \geq \alpha$ в число ограничений задачи (2). Если $M_0 \neq R_n$, то это неравенство в (2) можно отбросить.

Замечание 2. Если $\max_{1 \leq j \leq m} f_j(x)$ и функции $f_j(x)$ линейны, то удобно положить

$$M_0 = \text{epi}(f, R_n).$$

Тогда для всех $k \in K$ точки z'_k, z''_k в п. 5 метода можно считать точками пересечения отрезков $[v'_k, w_k], [v''_k, u_k]$, соответственно, с границей множества $\text{epi}(f, R_n)$ и положить $M_{k+1} = M_k = \text{epi}(f, R_n)$.

Замечание 3. Если множество D в (1) является многогранником, то естественно положить $G_0 = D$, поскольку нет необходимости в построении множеств, аппроксимирующих D . В таком случае согласно (7) будет выполняться равенство $G_k = D$ для всех $k \in K$.

Замечание 4. Если задача (1) имеет общий вид, то начальные аппроксимирующие множества G_0, M_0 удобно задать линейными неравенствами. Тогда в силу (6), (7), (9) задачи (2) для всех $k \in K$ будут задачами линейного программирования.

Замечание 5. Согласно п. 2 метода $x_k \in D$ для всех $k \in K$, т. е. с учётом (13)

$$f(x_k) \geq f^* \geq \gamma_k, \quad k \in K.$$

Поэтому, если для некоторого $k \in K$ выполняется неравенство

$$f(x_k) - \gamma_k \leq \mathcal{E},$$

где $\mathcal{E} > 0$, то x_k — $\mathcal{E}$ -решение задачи (1), и процесс построения приближений при желании можно прекратить.

Замечание 6. Для методов [9–11] практические расчёты на тестовых задачах, где решениями являлись граничные точки множества D , показали следующее. Процесс решения задач ускорялся, если для построения аппроксимирующих надграфиков множеств использовались отсечения, построенные одновременно на основе точек как принадлежащих, так и не принадлежащих D . В связи с этим в предложенном выше методе заложена возможность построения секущих плоскостей с использованием одновременно точек y_k и x_k , если $y_k \notin D$.

Замечание 7. Если положить $\sigma_k = f(x_k)$, то в силу включений $(x_k, f(x_k)) \in \text{epi}(f, R_n) \subset M_k$ для точки u_k выполняются условия (8), причём $u_k \notin \text{int } \text{epi}(f, R_n)$. Если на k -ом шаге $x_k = y_k$, то значение σ_k можно выбрать согласно неравенствам $\gamma_k \leq \sigma_k \leq f(x_k)$. При этом второе из условий (8), очевидно, выполнится.

Замечание 8. Для выбора вспомогательных точек v'_k, v''_k имеется много возможностей. Допустимо, в частности, последовательности $\{v'_k\}, \{v''_k\}, k \in K$, задавать совпадающими друг с другом. Если для всех $k \in K$ положить $v'_k = v''_k = \bar{v}$, где $\bar{v} \in \text{int } \text{epi}(f, R_n)$, то на всех итерациях метода при построении отсечений будет использоваться лишь одна точка $\bar{v}$, как, например, в методах [1, 9–11]. Однако, как отмечено выше, эту вспомогательную точку $\bar{v}$ предпочтительнее изменять от шага к шагу, в частности, приближая её к точке (x^*, f^*) . В связи с этим в методе и заложена возможность таких изменений путем задания последовательностей $\{v'_k\}, \{v''_k\}$.

Замечание 9. Как уже сказано, в случае $x_k = y_k$ допустимо положить $\sigma_k = \gamma_k$. Тогда $w_k = u_k$, и при $v'_k = v''_k$ точки z'_k и z''_k можно задать совпадающими. Если при этом множества B'_k и B''_k также выбрать одинаковыми, то выполнится равенство $T'_k = T''_k$.

3. Сходимость метода

Перейдём к исследованию сходимости предложенного метода.

В силу ограниченности множества G_0 количество способов (6), (7) построения множеств $G_k, k > 0$, а также построения точек y_k, x_k, z_k, w_k, u_k последовательности $\{w_k\}, \{u_k\}, \{z_k\}$ ограничено. Будем предполагать далее, что последовательности вспомогательных точек $v'_k, v''_k, k \in K$, выбираются ограниченными. Тогда согласно п. 5 метода ограниченными являются и последовательности $\{z'_k\}, \{z''_k\}, k \in K$.

Лемма 3. Любые предельные точки последовательностей $\{w_k\}, \{u_k\}, k \in K$, принадлежат множеству $\text{epi}(f, R_n)$.

Доказательство. Пусть $\{w_k\}, k \in K' \subset K$, и $\{u_k\}, k \in K'' \subset K$, – сходящиеся подпоследовательности последовательностей $\{w_k\}, k \in K$, и $\{u_k\}, k \in K$, а $\bar{w} = (\bar{y}, \bar{\gamma})$ и $\bar{u} = (\bar{x}, \bar{\sigma})$ – их предельные точки соответственно. Покажем, что

$$\bar{w} \in \text{epi}(f, R_n), \quad \bar{u} \in \text{epi}(f, R_n). \quad (14)$$

Для обоснования включений (14) докажем сначала равенства

$$\lim_{k \in K'} \|z'_k - w_k\| = 0, \quad \lim_{k \in K''} \|z''_k - u_k\| = 0. \quad (15)$$

Пусть номера $s, p_s \in K'$ и $l, p_l \in K''$ такие, что $p_s > s, p_l > l$. В силу выбора точек z'_k, z''_k и множеств B'_k, B''_k в пп. 5, 6 метода, а также равенства (9) выполняются включения $M_{p_s} \subset M_s, M_{p_l} \subset M_l$. Значит, любой вектор из множества B'_s является обобщенно-опорным к множеству M_{p_s} в точке z'_s и любой вектор из множества B'_l является обобщенно-опорным к множеству M_{p_l} в точке z'_l , а поскольку $w_{p_s} \in M_{p_s}, u_{p_l} \in M_{p_l}$ согласно (2), (8), то

$$\langle b, w_{p_s} - z'_s \rangle \leq 0 \quad \forall b \in B'_s, \quad \langle b, u_{p_l} - z'_l \rangle \leq 0 \quad \forall b \in B'_l. \quad (16)$$

Но точки z'_k, z''_k можно представить в виде

$$z'_k = w_k + \lambda'_k(v'_k - w_k), \quad z''_k = u_k + \lambda''_k(v''_k - u_k) \quad \forall k \in K. \quad (17)$$

Тогда из неравенств (16) следует, что

$$\langle b, w_s - w_{p_s} \rangle \geq \lambda'_s \langle b, w_s - v'_s \rangle \quad \forall b \in B'_s, \quad \langle b, u_l - u_{p_l} \rangle \geq \lambda''_l \langle b, u_l - v''_l \rangle \quad \forall b \in B'_l. \quad (18)$$

С учётом выбора точек $v'_k, v''_k, k \in K$, по лемме 1 из [2] найдутся такие $\beta', \beta'' > 0$, что

$$\langle b, w_s - v'_s \rangle \geq \beta' \quad \forall b \in B'_s, \quad \langle b, u_l - v''_l \rangle \geq \beta'' \quad \forall b \in B'_l.$$

Поэтому в силу равенств $\|b\| = 1$, выполняющихся для всех $b \in B'_s$ и B'_l , из (18) следуют неравенства

$$\|w_s - w_{p_s}\| \geq \beta' \lambda'_s, \quad \|u_l - u_{p_l}\| \geq \beta'' \lambda''_l,$$

справедливые для любых пар номеров $s, p_s \in K', l, p_l \in K''$ таких, что $p_s > s$, $p_l > l$. Отсюда и из сходимости последовательностей $\{w_k\}, k \in K'$, и $\{u_k\}, M_k''$, получаем

$$\lambda'_k \rightarrow 0, k \rightarrow \infty, k \in K', \lambda''_k \rightarrow 0, k \rightarrow \infty, k \in K''.$$

Тогда из равенств (17) с учётом ограниченности последовательностей $\{\|v'_k - w_k\|\}, k \in K', \{\|v''_k - u_k\|\}, k \in K''$, следуют равенства (15).

Докажем теперь включения (14). Так как $\{w_k\}, k \in K'$, и $\{u_k\}, k \in K''$, ограничены, то с учётом (15) последовательности $\{r'_k\}, k \in K'$, и $\{r''_k\}, k \in K''$, также ограничены. Выделим из них сходящиеся подпоследовательности $\{r'_k\}, k \in \bar{K}' \subset K'$, и $\{r''_k\}, k \in \bar{K}'' \subset K''$, и пусть $\bar{r}$ и $\bar{r}'$ – их предельные точки соответственно. Заметим, что

$$\bar{r} \in \text{epi}(f, R_n), \bar{r}' \in \text{epi}(f, R_n) \quad (19)$$

в силу замкнутости множества $\text{epi}(f, R_n)$. Поскольку

$$r'_k = w_k + q'_k(z'_k - w_k) \quad \forall k \in \bar{K}', \quad r''_k = u_k + q''_k(z''_k - u_k) \quad \forall k \in \bar{K}'',$$

и ввиду (15)

$$\lim_{k \in \bar{K}'} \|z'_k - w_k\| = 0, \quad \lim_{k \in \bar{K}''} \|z''_k - u_k\| = 0,$$

то $\bar{r} = \bar{w}$ и $\bar{r}' = \bar{u}$. Тогда отсюда и из (19) следуют включения (14). $\square$

Лемма 4. Пусть $\bar{w} = (\bar{y}, \bar{\gamma})$ – предельная точка последовательности $\{w_k\}, k \in K$, а $\bar{u} = (\bar{x}, \bar{\sigma})$ – предельная точка последовательности $\{u_k\}, k \in K$. Тогда выполняются равенства

$$f(\bar{y}) = \bar{\gamma}, \quad f(\bar{x}) = \bar{\sigma}. \quad (20)$$

Доказательство. По лемме 3 для точек $\bar{w}$ и $\bar{u}$ справедливы включения (14). Следовательно,

$$\bar{\gamma} \geq f(\bar{y}), \quad \bar{\sigma} \geq f(\bar{x}). \quad (21)$$

Докажем теперь, что выполняются неравенства

$$\bar{\gamma} \leq f(\bar{y}), \quad \bar{\sigma} \leq f(\bar{x}). \quad (22)$$

Так как $(y_k, f(y_k)) \in \text{epi}(f, R_n)$, то ввиду (10) $(y_k, f(y_k)) \in M_k$ для всех $k \in K$. Кроме того, согласно (2) $y_k \in G_k, k \in K$, а поскольку $G_k \subset G_0, k \in K$, то $f(y_k) \geq \min \{f(x) : x \in G_0\} \geq \alpha$ для всех $k \in K$. Таким образом, точка $(y_k, f(y_k))$ для всех $k \in K$ удовлетворяет ограничениям задачи (2). Значит, для решения (y_k, γ_k) этой задачи справедливо неравенство

$$\gamma_k \leq f(y_k)$$

для всех $k \in K$. Отсюда следует первое из неравенств (22). Второе из этих неравенств вытекает из условия (8) выбора чисел $\sigma_k, k \in K$. Тогда из (21), (22) следуют равенства (20). $\square$

Лемма 5. Пусть подмножество номеров $\bar{K} \subset K$ такое, что последовательности $\{x_k\}, k \in \bar{K}$, и $\{y_k\}, k \in \bar{K}$, являются сходящимися. Пусть $\bar{x}$ и $\bar{y}$ – предельные точки этих подпоследовательностей соответственно. Тогда

$$f(\bar{x}) = f(\bar{y}). \quad (23)$$

Доказательство. Если для бесконечного числа номеров $k \in \bar{K}$ выполняется включение $y_k \in D$, то для этих номеров $x_k = y_k$, и утверждение (23) очевидно. Поэтому будем считать далее, что $y_k \notin D$ для всех $k \in \bar{K}$, начиная с некоторого номера $\bar{k} \in \bar{K}$.

По методике обоснования леммы 3 докажем следующее равенство

$$\lim_{k \in \bar{K}} \|z_k - y_k\| = 0. \quad (24)$$

Сразу отметим, что согласно п. 2 метода

$$z_k = y_k + \lambda_k(v - y_k) \quad \forall k \in \bar{K}. \quad (25)$$

Зафиксируем номера $k, p_k \in \bar{K}$ так, что $p_k > k \geq \bar{k}$. В силу (6), (7) выполняется включение $G_{p_k} \subset G_k$. Кроме того, $y_{p_k} \in G_{p_k}$, а любой вектор множества A_k является обобщенно-опорным для множества G_{p_k} в точке z_k . Следовательно, $\langle a, y_{p_k} - z_k \rangle \leq 0$ для всех $a \in A_k$. Отсюда с учётом (25) для всех $a \in A_k$ имеем

$$\langle a, y_k - y_{p_k} \rangle \geq \lambda_k \langle a, y_k - v \rangle.$$

По лемме [2] найдётся такое $\beta > 0$, что $\langle a, y_k - v \rangle \geq \beta$ для всех $a \in A_k$, $k \in \bar{K}$, $k \geq \bar{k}$. Значит, $\langle a, y_k - y_{p_k} \rangle \geq \beta \lambda_k$ для всех $a \in A_k$, и

$$\|y_k - y_{p_k}\| \geq \beta \gamma_k.$$

Отсюда и из сходимости последовательности $\{y_k\}$, $k \in \bar{K}$, вытекает предельное соотношение $\lambda_k \rightarrow 0$, $k \rightarrow \infty$, $k \in \bar{K}$. Тогда из (25) с учётом ограниченности $\{\|v - y_k\|\}$, $k \in \bar{K}$, следует (24). Наконец, из равенств (4), (24) следует (23). $\square$

Теорема 2. Пусть последовательность $\{u_k\}$, $k \in K$, построена согласно предложенному методу. Тогда для любой её предельной точки $\bar{u} = (\bar{x}, \bar{\sigma})$ выполняются соотношения

$$\bar{x} \in X^*, \quad \bar{\sigma} \in f^*. \quad (26)$$

Доказательство. Пусть $\bar{u}$ – предельная точка сходящейся подпоследовательности $\{u_k\}$, $k \in K' \subset K$, последовательности $\{u_k\}$, $k \in K$. Выделим теперь из последовательности точек $w_k = (y_k, \gamma_k)$, $k \in K'$, сходящуюся подпоследовательность $\{w_k\}$, $k \in \bar{K} \subset K'$, и пусть $\bar{w} = (\bar{y}, \bar{\gamma})$ – её предельная точка. Для точек $\bar{u}, \bar{w}$ согласно лемме 4 справедливы равенства (20), а для точек $\bar{x}, \bar{y}$ ввиду леммы 5 выполняется равенство (23). Значит,

$$f(\bar{x}) = \bar{\sigma} = \bar{\gamma}. \quad (27)$$

Но $f(\bar{x}) \geq f^*$, так как $\bar{x} \in D$, а $\bar{\gamma} \leq f^*$ в силу (13). Отсюда и из равенств (27) следуют соотношения (26). $\square$

Литература

1. Булатов В.П. Методы погружения в задачах оптимизации. Новосибирск: Наука, 1977. 161 с.
2. Заботин И.Я. О некоторых алгоритмах погружений-отсечений для задачи математического программирования // Изв. Иркут. гос. ун-та. Сер. Матем. 2011. Т. 4, № 2. С. 91–101.
3. Заботин И.Я., Яруллин Р.С. Алгоритм отсечений с аппроксимацией надграфика // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. 2013. Т. 155, № 4. С. 48–54.

4. Поляк Б.Т. Введение в оптимизацию. М.: Наука., 1983. 384 с.
5. Zabol'tin I.Ya., Yarullin R.S. One approach to constructing cutting algorithms with dropping of cutting planes // Russ. Math. (Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved.). 2013. V. 57, No 3. P. 60–64. <https://doi.org/10.3103/S1066369X13030092>.
6. Zabol'tin I.Ya., Yarullin R.S. A cutting-plane method without inclusions of approximating sets for conditional minimization // Lobachevskii J. Math. 2015. V. 36, No 2. P. 132–138. <https://doi.org/10.1134/S1995080215020195>.
7. Zabol'tin I.Ya., Yarullin R.S. Cutting-plane method based on epigraph approximation with discarding the cutting planes // Autom. Remote Control. 2015. V. 76, No 11. P. 1966–1975. <https://doi.org/10.1134/S0005117915110065>.
8. Демьянов В.Ф., Васильев Л.В. Недифференцируемая оптимизация. М.: Наука, 1981. 384 с.
9. Zabol'tin I., Shulgina O., Yarullin R. A minimization algorithm with approximation of an epigraph of the objective function and a constraint set // EUR Workshop Proc. V. 1623: Proc. 9th Int. Conf. on Discrete Optimization and Operations Research and Scientific School (DOOR-SUP 2016). Vladivostok, 2016. P. 321–324.
10. Zabol'tin I.Y., Shul'gina O.N., Yarullin R.S. A minimization method with approximation of feasible set and epigraph of objective function // Russ. Math. (Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved.). 2016. V. 60, No 11. P. 78–81. <https://doi.org/10.3103/S1066369X16110098>.
11. Shulgina O.N., Yarullin R.S., Zabol'tin I.Ya. A cutting method with approximation of a constraint region and an epigraph for solving conditional minimization problems // Lobachevskii J. Math. 2018. V. 39, No 6. P. 847–854. <https://doi.org/10.1134/S1995080218060197>.

Поступила в редакцию 20.07.2023

Принята к публикации 04.09.2023

Заботин, Игорь Ярославич, доктор физико-математических наук, профессор кафедры анализа данных и технологий программирования

Казанский (Приволжский) федеральный университет

ул. Кремлевская, д. 18, г. Казань, 420008, Россия

E-mail: IYaZabol'tin@mail.ru

Казаева Ксения Евгеньевна, старший преподаватель кафедры анализа данных и технологий программирования

Казанский (Приволжский) федеральный университет

ул. Кремлевская, д. 18, г. Казань, 420008, Россия

E-mail: k.e.kazaeva@gmail.com

Шульгина Оксана Николаевна, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры анализа данных и технологий программирования

Казанский (Приволжский) федеральный университет

ул. Кремлевская, д. 18, г. Казань, 420008, Россия

E-mail: onshul@mail.ru

ORIGINAL ARTICLE

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.208-218

**A Cutting-Plane Method with Internal Iteration Points
for the General Convex Programming Problem**

I.Ya. Zabotin*, K.E. Kazaeva**, O.N. Shulgina***

Kazan Federal University, Kazan, 420008 Russia

E-mail: *IYaZabotin@mail.ru, **k.e.kazaeva@gmail.com, ***onshul@mail.ru

Received July 20, 2023; Accepted September 4, 2023

Abstract

A cutting method for solving the problem of convex programming was proposed. The method calculates iteration points based on approximation by polyhedral sets of the constraint region and the epigraph of the objective function. Its distinguishing feature is that the main sequence of approximations is constructed within the admissible region. At each step, it is also possible to assess how close the current value of the function is to the optimal value. The convergence of the method was proved. A few of its implementations were outlined.

Keywords: convex programming, conditional minimization, optimal value, set approximation, function epigraph, iteration point, sequence of approximations, cutting hyperplane, convergence

References

1. Bulatov V.P. *Metody pogruzeniya v zadachakh optimizatsii* [Embedding Methods in Optimization Problems]. Novosibirsk, Nauka, 1977. 161 p. (In Russian)
2. Zabotin I.Ya. Some embedding-cutting algorithms for mathematical programming problems. *Izv. Irkutsk. Gos. Univ. Ser. Mat.*, 2011, vol. 4, no. 2, pp. 91–101. (In Russian)
3. Zabotin I.Ya., Yarullin R.S. A cutting plane algorithm with an approximation of an epigraph. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2013, vol. 155, no. 4, pp. 48–54. (In Russian)
4. Polyak B.T. *Vvedenie v optimizatsiyu* [Introduction to Optimization]. Moscow, Nauka, 1983. 384 p. (In Russian)
5. Zabotin I.Ya., Yarullin R.S. One approach to constructing cutting algorithms with dropping of cutting planes. *Russ. Math. (Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved.)*, 2013, vol. 57, no. 3, pp. 60–64. <https://doi.org/10.3103/S1066369X13030092>.
6. Zabotin I.Ya., Yarullin R.S. A cutting-plane method without inclusions of approximating sets for conditional minimization. *Lobachevskii J. Math.*, 2015, vol. 36, no. 2, pp. 132–138. <https://doi.org/10.1134/S1995080215020195>.
7. Zabotin I.Ya., Yarullin R. S. Cutting-plane method based on epigraph approximation with discarding the cutting planes. *Autom. Remote Control*, 2015, vol. 76, no. 11, pp. 1966–1975. <https://doi.org/10.1134/S0005117915110065>.

8. Demyanov V. F., Vasilev L. V. *Nedifferentsiruemaya optimizatsiya* [Nondifferentiable Optimization]. Moscow, Nauka, 1981. 384 p. (In Russian)
9. Zabol'tin I., Shulgina O., Yarul'lin R. A minimization algorithm with approximation of an epigraph of the objective function and a constraint set. *CEUR Workshop Proc.* Vol. 1623: Proc. 9th Int. Conf. on Discrete Optimization and Operations Research and Scientific School (DOOR-SUP 2016). Vladivostok, 2016, pp. 321–324.
10. Zabol'tin I.Y., Shul'gina O.N., Yarul'lin R.S. A minimization method with approximation of feasible set and epigraph of objective function. *Russ. Math. (Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved.)*, 2016, vol. 60, no. 11, pp. 78–81. <https://doi.org/10.3103/S1066369X16110098>.
11. Shulgina O.N., Yarul'lin R.S., Zabol'tin I.Ya. A cutting method with approximation of a constraint region and an epigraph for solving conditional minimization problems. *Lobachevskii J. Math.*, 2018, vol. 39, no. 6, pp. 847–854. <https://doi.org/10.1134/S1995080218060197>.

⟨ **Для цитирования:** Заботин И.Я., Казаева К.Е., Шульгина О.Н. Вариант метода отсечений с внутренними итерационными точками для задачи выпуклого программирования общего вида // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. 2023. Т. 165, кн. 3. С. 208–218. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.208-218>. ⟩

⟨ **For citation:** Zabol'tin I.Ya., Kazaeva K.E., Shulgina O.N. A cutting-plane method with internal iteration points for the general convex programming problem. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2023, vol. 165, no. 3, pp. 208–218. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.208-218>. (In Russian) ⟩

ОРИГИНАЛЬНАЯ СТАТЬЯ

УДК 539.5

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.219-235

О ВЛИЯНИИ НАПРЯЖЕНИЙ НА НЕРАВНОВЕСНУЮ ВЯЗКОСТЬ СТЕКОЛ

У. П. Карасева, А. Б. Фрейдин

Институт проблем машиноведения РАН, г. Санкт-Петербург, 199178, Россия

Аннотация

Обсуждены два процесса, связанных с релаксацией структуры стеклообразного материала. Один процесс порождает релаксацию напряжений. Второй, более медленный процесс связан с релаксацией структуры к равновесному состоянию, он продолжается и после релаксации напряжений и описан изменением фиктивной температуры. Оба процесса приводят к изменению коэффициента вязкости. В настоящей работе проведен анализ модели неравновесной вязкости с учетом обоих процессов релаксации и продемонстрирована важность учета напряжений при моделировании вязкоупругого поведения стеклообразного материала на примере решения задачи описания релаксации напряжений в пластине под действием температурных напряжений.

Ключевые слова: релаксация напряжений, модели вязкости, фиктивная температура, неравновесность структуры, температурные напряжения

Введение

Применение моделей с изменяющимся коэффициентом вязкости является актуальным способом моделирования поведения материалов. Иногда в расчетах используют прямую зависимость вязкости от времени, однако эта зависимость должна следовать из зависимости вязкости от напряжений и/или релаксирующих параметров структуры. Примерами материалов, вязкость которых зависит от напряжений, являются диоксид кремния [1], возникновение которого исследовалось в химической реакции окисления кремния, и литизированный кремний, возникающий в литий-ионных батареях [2]. В результате возникает новый материал, изменяется реология. Релаксирующие напряжения при этом могут влиять на вязкость через инварианты тензора напряжений или комбинации инвариантов [3]. С другой стороны, причиной изменения вязкости стеклообразных материалов является неравновесность микроструктуры, которая, релаксируя к равновесному состоянию, изменяет коэффициент вязкости [4]. В этом случае вязкое деформирование материалов может быть описано моделями с изменяющимся коэффициентом вязкости, зависящим от фиктивной температуры, характеризующей степень неравновесности структуры (см., например, [5–7]).

Процессы релаксации также имеют большое практическое значение для различных высокотехнологичных применений стекла [8]. Например, характеристики стекла для жидкокристаллических дисплеев определяются объемной релаксацией, то есть уплотнением [9, 10]. Это особенно важно для высокопроизводительных дисплеев, где малый размер пикселей приводит к ужесточению требований к уплотнению стекла во избежание смещения пикселей [11].

Одним из широко используемых методов упрочнения стекол является ионный обмен [12], при котором вследствие обмена ионами в приповерхностных слоях стекла и внедрения ионов большего размера возникают сжимающие напряжения. Однако возникающие напряжения релаксируют, в связи с чем для применения упрочненных стекол важно знать реальные значения остаточных напряжений. Температура ионного обмена оказывается существенно ограниченной релаксацией возникающих напряжений [13–16]. Релаксация также оказывает большое влияние на кинетику процесса взаимной диффузии [17–20].

Внутренняя устойчивость к повреждениям некоторых составов стекол также в значительной степени зависит от степени их неравновесности [21–23]. В затухании сигнала в оптическом волокне для телекоммуникаций доминирует рэлеевское рассеяние, которое является сложной немонотонной функцией тепловой истории стекла и может быть оптимизировано путем надлежащего управления процессом релаксации структуры стекла [24–26].

К настоящему времени хорошо изучены модели вязкости, зависящей от фиктивной температуры, проведен их сравнительный анализ. Также имеются модели нелинейной вязкости, зависящей от напряжений. Однако не рассматривались одновременно учет влияния напряжения и фиктивной температуры на релаксацию напряжений и поведение вязкости. В связи с этим в работе проведен анализ модели с изменяющимся коэффициентом вязкости с учетом обоих процессов релаксации.

Статья организована следующим образом. В следующем разделе приведены определяющие соотношения. Затем дано определение фиктивной температуры и описана модель вязкости. Далее решена задача о распределении и релаксации температурных напряжений в пластине, являющихся аналогом напряжений, возникающих в процессе ионного обмена.

1. Определяющие соотношения

Для стандартной модели вязкоупругого материала (материала Пойнтинга–Томпсона [27], рис. 1) была исследована задача описания релаксации температурных напряжений с коэффициентом вязкости, зависящим от напряжений и фиктивной температуры. Исследуемая нами модель вязкости будет описана в следующих разделах.

Так как

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{e} + \frac{\vartheta}{3}\mathbf{I}; \quad \mathbf{e} = dev \boldsymbol{\varepsilon}; \quad \vartheta = tr \boldsymbol{\varepsilon};$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{s} + \sigma \mathbf{I}; \quad \mathbf{s} = dev \boldsymbol{\sigma}; \quad \sigma = \frac{tr \boldsymbol{\sigma}}{3};$$

$$\mathbf{s}_I = 2\mu_1 \mathbf{e}_I; \quad \mathbf{s}_{II} = 2\mu_2 \mathbf{e}_2 = \eta \dot{\mathbf{e}}^\eta;$$

$$\dot{\mathbf{e}} = \dot{\mathbf{e}}_I + \dot{\mathbf{e}}_2 + \dot{\mathbf{e}}^\eta; \quad \mathbf{s} = \mathbf{s}_I + \mathbf{s}_{II};$$

где $\boldsymbol{\varepsilon}$ – тензор деформаций, $\boldsymbol{\sigma}$ – тензор напряжений, то определяющее соотношение, связывающее девиаторы тензоров деформаций и напряжений, имеет следующий вид

$$\left(1 + \frac{\mu_1}{\mu_2}\right) \dot{\mathbf{e}} + 2\frac{\mu_1}{\eta} \mathbf{e} = \frac{\dot{\mathbf{s}}}{2\mu_2} + \frac{\mathbf{s}}{\eta}. \quad (1)$$

Объемная деформация ϑ и гидростатическая составляющая тензора напряжений σ связаны законом

$$\sigma = K\vartheta, \quad (2)$$

где K – объемный модуль упругости.

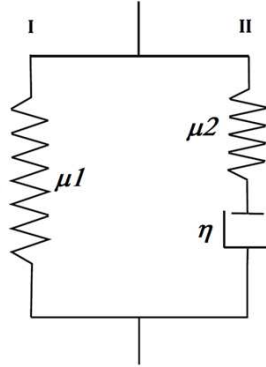


Рис. 1. Стандартная модель вязкоупругого материала

2. Фиктивная температура

Термодинамика определяет стеклообразное состояние как неравновесное состояние метастабильной жидкости с замороженной структурой [28, 29]. Для описания степени неравновесности структуры Тулом в 1946 г. [30] было введено понятие фиктивной температуры. По Тулу, величина T_f образца исследуемого вещества равна величине фактической температуры образца этого вещества, имеющего ту же структуру, что и исследуемый образец, но находящегося в равновесии. Следовательно, вещество, находящееся в равновесном состоянии, всегда имеет $T_f = T$, и для полной характеристики такого вещества в изобарических условиях достаточно знать его температуру T . У вещества в неравновесном состоянии $T_f \neq T$, и состояние вещества должно характеризоваться двумя параметрами T и T_f . Их соотношение определяет степень неравновесности текущего состояния [28].

Иными словами, если стеклообразный материал находится в состоянии термодинамического равновесия при постоянном давлении, то любое свойство P однозначно определяется температурой вещества. Для неравновесного состояния это не так: при одной и той же температуре свойство может быть различным, что может быть связано с возможностью различных неравновесных структур при данной температуре. В этом случае фиктивная температура есть количественная характеристика степени неравновесности, величина которой может быть установлена по величине свойства P [28].

Известно, что в стеклообразном состоянии структура вещества заморожена (то есть не зависит ни от температуры, ни от времени), следовательно, $T_f = \text{const}$. Значит, если на диаграмме свойство–температура (рис. 2) через точку, характеризующую свойство исследуемого образца, провести температурную зависимость свойства, характерную для данного вещества в стеклообразном состоянии, то все точки на ней будут соответствовать одной и той же структуре. Далее найдем точку пересечения этой зависимости с равновесной зависимостью свойства от температуры. Температура, соответствующая данной точке пересечения, и будет считаться искомой величиной T_f .

Таким образом, с помощью T_f можно полностью описать структурные особенности образца, от которых зависят все свойства вещества. И хотя величина T_f определялась с помощью какого-то одного произвольно выбранного свойства, ее можно использовать при расчете любых интересующих нас свойств образца.

Однако структурное состояние стеклообразного вещества не может быть описано на основе предположения о наличии в веществе только одного релаксацион-

ного процесса. Это означает, что для описания состояния стеклообразного вещества недостаточно одного внутреннего параметра, следовательно, и одной T_f . В этом случае для количественного описания явления используется представление о нескольких фиктивных температурах T_{fi} , сумма которых и характеризует действительное структурное состояние вещества. Подробнее об этом сказано в следующем разделе.

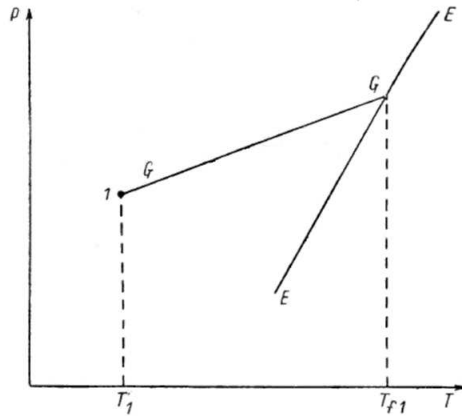


Рис. 2. Графический способ определения фиктивной температуры T_f . EE – равновесная зависимость свойства, GG – зависимость свойства, характерная для вещества в стеклообразном состоянии [28]

3. Модель вязкости неравновесного стеклообразного материала, зависящей от фиктивной температуры

Существует несколько моделей для описания зависимости вязкости $\eta(T, T_f)$ от текущей и фиктивной температур, включая классические модели Нараянасами [5] и Мазурина с соавторами [6]. Однако было показано, что модель Мауро–Аллана–Потузака (МАР) [7] дает преимущества при описании зависимости вязкости как от фактической, так и от фиктивной температур с использованием унифицированного набора параметров. В связи с этим в данной работе именно эта модель использовалась в качестве исходной. Примем, что

$$\eta(T, T_f) = (\eta_{eq}(T_f))^x (\eta_{ne}(T, T_f))^{1-x}. \quad (3)$$

Здесь T – фактическая температура, T_f – фиктивная температура (температура, при которой текущее состояние микроструктуры материала было бы равновесным), параметр x характеризует степень неравновесности и определяется формулой

$$x = \left(\frac{T}{T_f} \right)^p, \quad (4)$$

где p – параметр материала; $\eta_{eq}(T_f)$ и $\eta_{ne}(T, T_f)$ – вязкость равновесного состояния при температуре T_f и добавка к равновесной вязкости, характеризующая вклад неравновесности, определяются формулами

$$\lg \frac{\eta_{eq}(T_f)}{\eta_\infty} = \frac{C}{T_f} \exp \left(\frac{D}{T_f} \right); \quad \lg \frac{\eta_{ne}(T, T_f)}{A} = \lg \exp \left(\frac{\Delta H}{kT} \right) - BT_f, \quad (5)$$

где η_∞ – экстраполированная вязкость при бесконечной фиктивной температуре, k – постоянная Больцмана, C, D – параметры материала (см. подробнее в [31]).

Величины, входящие во вторую из формул (5), имеют следующий смысл. A – подгоночный параметр, имеющий смысл вязкости стекла в пределе $T_f \rightarrow 0$, $T \rightarrow \infty$. Здесь подразумевается, что измерение вязкости происходит мгновенно, то есть стекло приходит в равновесное состояние при $T \rightarrow 0$ и мгновенно доводится до $T \rightarrow \infty$, и в этот момент, прежде чем стекло начнет релаксировать при высокой температуре, измеряется его вязкость.

B – наклон касательной к кривой зависимости вязкость–фиктивная температура при фиксированной температуре T . Хотя описание фиктивной температуры стекла не является строгим (даже при использовании континуума фиктивных температур), это удобный параметр для моделирования зависимости таких свойств стекла, как вязкость, от термической истории. Два стекла одного и того же состава при одинаковых температуре и давлении будут демонстрировать различное поведение при вязком течении в зависимости от их термической истории. Стекло, охлажденное быстрее, раньше начинает стеклование, поскольку в процессе охлаждения проходит меньше времени для установления равновесия по сравнению с медленно охлаждаемой системой. Это приводит к более высокой фиктивной температуре для стекла с более быстрым охлаждением. Стекла с более высокой фиктивной температурой обладают меньшей вязкостью.

ΔH – энтальпия активации релаксационного процесса, постоянная для данного стекла. Для начала релаксационного процесса требуется преодолеть активационный барьер ΔH .

Как было отмечено выше, структурное состояние стеклообразного вещества не может быть описано на основе предположения о наличии только одного релаксационного процесса, что было показано в экспериментах Ритланда [32]. В связи с этим Нараянасами [5] предложил описывать неравновесное состояние стекла, используя несколько фиктивных температур T_{fi} . В этом случае средняя фиктивная температура [33]

$$T_f = \sum_{i=1}^n w_i T_{fi}, \quad (6)$$

где весовые коэффициенты w_i определяются аппроксимацией ряда Прони растянутой экспоненциальной функцией

$$\exp(-x^b) \approx \sum_{i=1}^n w_i \exp(-K_i x), \quad (7)$$

где $x \equiv t/\tau$, а весовые коэффициенты удовлетворяют условию $\sum_{i=1}^n w_i = 1$. Иными словами, с каждым отдельным членом ряда Прони связана одна компонента фиктивной температуры T_{fi} .

Показатель растянутой экспоненты характеризуется коэффициентом $0 < b \leq 1$. При $b = 1$ получается простая экспонента, которая описывает максвелловский закон релаксации с одним постоянным временем релаксации ($L(t) = L_0 \exp(-t/\tau)$, где L – любое свойство, связанное со структурой).

Появление дробной экспоненты с $b < 1$ при описании кинетических закономерностей указывает на присутствие нескольких путей для релаксации структуры, каждый из которых характеризуется своим временем релаксации, то есть существует спектр времен релаксации. Основная идея, объясняющая существование спектра времен релаксаций, состоит в том, что различным фрагментам стекла, отличающимся по составу и структуре, можно приписать свои времена релаксации. Из-за того, что время структурной релаксации не единственное, структура стекла замораживается в некотором интервале температур, а само стеклование размыто [29].

Согласно модели Филлипса показатель растянутой экспоненты связан с размерностью путей релаксации следующим образом [34]:

$$b = \frac{d^*}{d^* + 2}, \quad (8)$$

где размерность путей релаксации определена как $d^* = df$, d – размерность системы, f – доля путей релаксации, активированных для конкретного изучаемого процесса. Например, в случае трехмерного стеклянного тела, в котором активированы все пути релаксации ($d = 3$, $f = 1$), показатель растянутой экспоненты $b = 3/5$ [35]. Эта величина и будет использована далее.

Релаксационное поведение стекла может быть рассчитано в терминах релаксации отдельных фиктивных температурных компонент с помощью набора из N связанных дифференциальных уравнений первого порядка [36]:

$$\frac{dT_{fi}}{dt} = \frac{T(t) - T_{fi}(t)}{\tau_i [T(t), T_f(t)]}, \quad i = \{1, \dots, N\}. \quad (9)$$

Здесь $T(t)$ – температурная история, которую в данной работе мы примем постоянной, $T = \text{const}$. Времена релаксации τ_i в уравнении (9) вычисляются как

$$\tau_i(T, T_f) = \tau(T, T_f) / K_i. \quad (10)$$

Другими словами, все N времен релаксации имеют общий коэффициент τ , который является функцией как фактической температуры T , так и средней фиктивной температуры T_f , задаваемой уравнением (6). Значения τ масштабируются коэффициентами K_i из аппроксимации ряда Прони в уравнении (7).

Коэффициент τ определяется неравновесной вязкостью согласно теории релаксации Максвелла

$$\tau(T, T_f) = \eta(T, T_f) / G, \quad (11)$$

где G имеет смысл модуля сдвига. В данной работе рассматривается случай $N = 2$.

4. Одновременный учет влияния напряжения и фиктивной температуры на процесс релаксации

Описанная выше модель учитывает только процесс, связанный с релаксацией структуры в силу температурных эффектов, то есть из-за того, что текущая температура отличается от равновесной. Для учета влияния напряжения мы предлагаем модифицировать второе выражение в (5) следующим образом:

$$\lg \frac{\eta_{ne}(T, T_f)}{A} = \lg \exp \left(\frac{\Delta H - \frac{\alpha (\text{tr} \boldsymbol{\sigma})^2}{G_*} - \beta \text{tr} \boldsymbol{\sigma}}{kT} \right) - BT_f, \quad (12)$$

где α и β – параметры материала, коэффициент G_* имеет размерность модуля упругости, $\text{tr} \boldsymbol{\sigma}$ – первый инвариант тензора напряжений.

В основе этой модели лежит концепция, согласно которой вязкое течение осуществляется благодаря наличию в стекле некоторого свободного объема, не занятого молекулами [29]. В (12) слагаемое с квадратичной зависимостью от первого инварианта тензора напряжений отражает снижение энергетического барьера, а слагаемое с линейной зависимостью от первого инварианта учитывает асимметричность этого снижения и различие между растягивающими и сжимающими напряжениями, которые могут увеличивать и уменьшать свободный объем.

5. Релаксации температурных напряжений в диске

В качестве примера решим задачу о температурных напряжениях, распределенных по толщине диска ($\theta = \theta(z)$). Рассмотрим диск, свободный от внешних нагрузок (рис. 3).

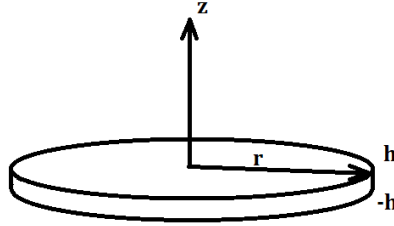


Рис. 3. Тонкий диск

Сначала найдем напряжения, порождаемые температурой в упругой пластине. Эти напряжения будут начальными для последующего этапа релаксации.

В цилиндрических координатах уравнения равновесия имеют вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{r\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{\partial \sigma_{rz}}{\partial z} + \frac{\sigma_r - \sigma_\varphi}{r} &= 0; \\ \frac{\partial \sigma_{\varphi r}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial \sigma_{\varphi z}}{\partial z} + 2 \frac{\sigma_{\varphi r}}{r} &= 0; \\ \frac{\partial \sigma_{zr}}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial \sigma_{z\varphi}}{\partial \varphi} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} + \frac{\sigma_{zr}}{r} &= 0.\end{aligned}\tag{13}$$

На верхней и нижней поверхностях $z = \pm h$, $\sigma_z = 0$, $\sigma_{\varphi z} = 0$ и $\sigma_{rz} = 0$. Тогда в силу уравнений равновесия эти напряжения равны нулю во всем диске. Также примем, что ненулевые напряжения не зависят от r и φ . Тогда $\sigma_{\varphi r} = 0$, и остается одно уравнение равновесия

$$\frac{\sigma_r - \sigma_\varphi}{r} = 0,\tag{14}$$

откуда следует, что

$$\sigma_r = \sigma_\varphi.\tag{15}$$

Закон Гука запишем в форме Дюамеля–Неймана, учитывающей температурное слагаемое:

$$\sigma_r = (\lambda + 2\mu) \varepsilon_r + \lambda (\varepsilon_\varphi + \varepsilon_z) - 3K \alpha_\theta \theta(z);\tag{16}$$

$$\sigma_\varphi = (\lambda + 2\mu) \varepsilon_\varphi + \lambda (\varepsilon_r + \varepsilon_z) - 3K \alpha_\theta \theta(z);\tag{17}$$

$$\sigma_z = (\lambda + 2\mu) \varepsilon_z + \lambda (\varepsilon_r + \varepsilon_\varphi) - 3K \alpha_\theta \theta(z).\tag{18}$$

Здесь α_θ – коэффициент линейного расширения, $\theta(z)$ – заданная функция температуры, $K = \lambda + \frac{2}{3}\mu$ – модуль объемного сжатия, λ и μ – коэффициенты Ламе.

Из (15) – (17) следует, что

$$\varepsilon_r = \varepsilon_\varphi.\tag{19}$$

При этом $\varepsilon_r = \varepsilon_r(z)$ и $\varepsilon_\varphi = \varepsilon_\varphi(z)$ – функции координаты z .

Так как $\sigma_z = 0$, из (18) и (19) следует, что

$$\varepsilon_z = \frac{9K \alpha_\theta \theta(z)}{3K + 4\mu} - \frac{3K - 2\mu}{3K + 4\mu} (\varepsilon_r + \varepsilon_\varphi) = \frac{9K \alpha_\theta \theta(z)}{3K + 4\mu} - \frac{3K - 2\mu}{3K + 4\mu} 2\varepsilon_r.\tag{20}$$

Тогда, подставив (20) в (16), получим

$$\sigma_r = \sigma_\varphi = \frac{18K\mu}{3K+4\mu}\varepsilon_r - \frac{18K\mu}{3K+4\mu}K\alpha_\theta\theta(z). \quad (21)$$

Распределение деформаций должно удовлетворять условиям совместности деформаций. Из равенства нулю напряжений $\sigma_{\varphi z}$, σ_{rz} и $\sigma_{\varphi r}$ следует, что $\varepsilon_{\varphi z} = 0$, $\varepsilon_{rz} = 0$ и $\varepsilon_{\varphi r} = 0$. Оставшиеся ненулевые деформации от r и φ не зависят. В результате условия совместности, записанные в цилиндрических координатах, сводятся к соотношениям

$$\frac{\partial^2 \varepsilon_r}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 \varepsilon_\varphi}{\partial z^2} = 0, \quad (22)$$

откуда следует, что

$$\varepsilon_r = \varepsilon_\varphi = A_1 z + A_2, \quad (23)$$

где A_1 и A_2 – константы интегрирования.

Подставив (23) в (21), получим

$$\sigma_r = \frac{18K\mu}{3K+4\mu}(A_1 z + A_2 - \alpha_\theta\theta(z)). \quad (24)$$

Константы A_1 и A_2 найдем из интегральных граничных условий для σ_r (в смысле Сен-Венана):

$$\int_{-h}^h \sigma_r dz = 0; \quad \int_{-h}^h \sigma_r z dz = 0. \quad (25)$$

Подставив (24) в (25), получим

$$A_1 = \frac{3\alpha_\theta}{2h^3} \int_{-h}^h \theta(z) z dz; \quad A_2 = \frac{\alpha_\theta}{2h} \int_{-h}^h \theta(z) dz = 0. \quad (26)$$

Зная A_1 и A_2 , найдем ε_r и ε_φ из (23) и ε_z из (20).

Распределение напряжений (24) используем далее как начальное условие $\sigma_r(z, t = 0)$ при решении вязкоупругой задачи.

Для вязкоупругого случая из определяющего соотношения (1) следует уравнение

$$\left(1 + \frac{\mu_1}{\mu_2}\right) \left(\dot{\varepsilon}_r - \frac{\dot{\vartheta}}{3}\right) + 2\frac{\mu_1}{\eta} \left(\varepsilon_r - \frac{\vartheta}{3}\right) = \frac{\dot{\sigma}_r - \dot{\sigma}}{2\mu_2} + \frac{\sigma_r - \sigma}{\eta}, \quad (27)$$

где гидростатическая составляющая тензора напряжений связана с объемной деформацией ϑ и температурой соотношением

$$\sigma = K(\vartheta - 3\alpha_\theta\theta(z)). \quad (28)$$

Можно убедиться в том, что при переходе к вязкоупругому случаю деформации ε_r и ε_φ остаются такими же, как в упругом случае, то есть не зависят от времени (но зависят от координаты z). Из (28) следует, что объемная деформация $\vartheta = \sigma/K + 3\alpha_\theta\theta(z) = 2\sigma_r/3K + 3\alpha_\theta\theta(z)$. Подставив это выражение в (27), получим

$$\left(\frac{1}{6\mu_2} + \frac{2}{9K} \left(1 + \frac{\mu_1}{\mu_2}\right)\right) \dot{\sigma}_r + \left(\frac{1}{3\eta} + \frac{4\mu_1}{9K\eta}\right) \sigma_r + \frac{2\mu_1}{\eta} (\alpha_\theta\theta(z) - A_1 z - A_2) = 0. \quad (29)$$

Подставив в (29) выражение для вязкости η в виде (3) с учетом влияния напряжений согласно (12), получим дифференциальное уравнение для нахождения распределения $\sigma_r(z, t)$. Решим это уравнение для случая $\theta(z) = \theta_0 \left(\frac{z}{h}\right)^2$ ($z = 0$ и $z = h$). Результаты представлены на рис. 4 для структур, близких к равновесной (при $\frac{T_f - T}{T_f} \ll 1$), и на рис. 5 вдали от равновесия (при $\frac{T_f - T}{T_f} \sim 1$). Показаны зависимости напряжений и вязкости на срединной плоскости $z = 0$ и внешней поверхности $z = h$. Параметры, при которых проводились расчеты, приведены в таблице 1. Величины параметров взяты из работы [7] и соответствуют экспериментальным данным.

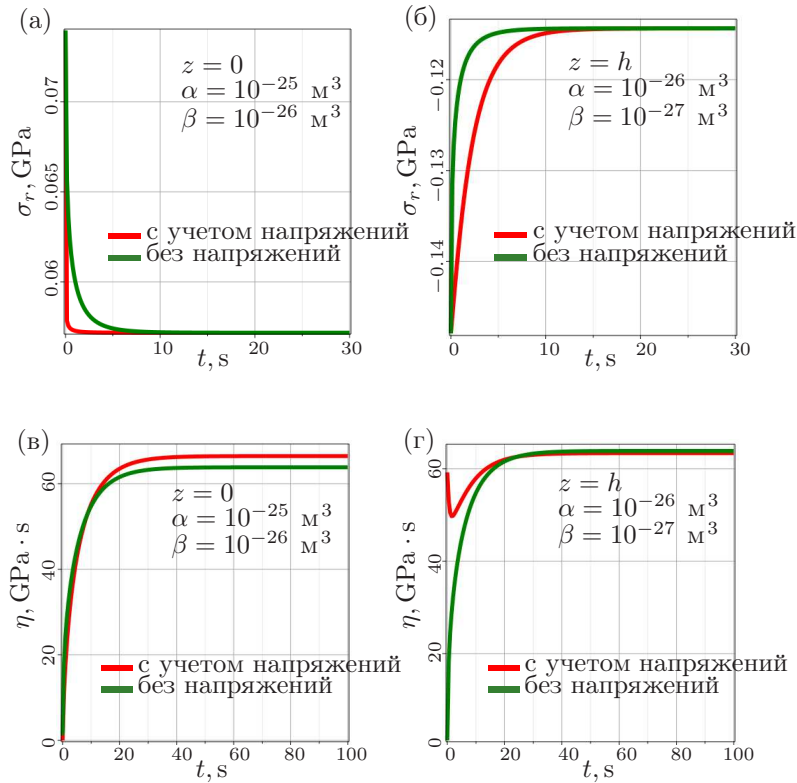


Рис. 4. Релаксация напряжения и зависимость вязкости от времени в случае структуры, близкой к равновесному состоянию, согласно модели, учитывающей и не учитывающей влияние напряжения на вязкость: (а), (в) – $z = 0$; (б), (г) – $z = h$

Табл. 1

Параметры материала, которые использовались при моделировании

Параметр	K, G_* [GPa]	μ_1 [GPa]	μ_2 [GPa]	θ_0 [$^{\circ}\text{C}$]	T [$^{\circ}\text{C}$]	p
Значение	30	20	15	300	650	6.32
Параметр	η_{∞} [Pa·s]	ΔH [J]	A [GPa·s]	B [$^{\circ}\text{C}^{-1}$]	G [GPa]	α_{θ} [$^{\circ}\text{C}^{-1}$]
Значение	0.05	$2.2 \cdot 10^{-19}$	394.2	0.0404	26	$9 \cdot 10^{-6}$

Результаты расчетов показывают, что для структуры, состояние которой близко к равновесному, на срединной плоскости растягивающее напряжение σ_r при использовании модели вязкости с учетом напряжений релаксирует быстрее, чем при использовании МАР-модели (3), так как учет напряжений уменьшает энергетический барьер (рис. 4 (а)). Вязкость при этом релаксирует к большему равновесному значению (рис. 4 (в)).

На поверхности диска сжимающее напряжение σ_r релаксирует медленнее при использовании модели вязкости с учетом напряжений, чем при использовании МАР-модели, так как учет знака напряжения в модели (12) через линейную зависимость от первого инварианта тензора напряжений увеличивает энергетический барьер, когда напряжения сжимающие (рис. 4 (б)). Начальное значение вязкости увеличивается, поэтому наблюдается падение вязкости в промежутке времени, соответствующем времени релаксации напряжения. Когда влияние напряжения становится незначительным, вязкость начинает релаксировать к равновесному состоянию (рис. 4 (г)).

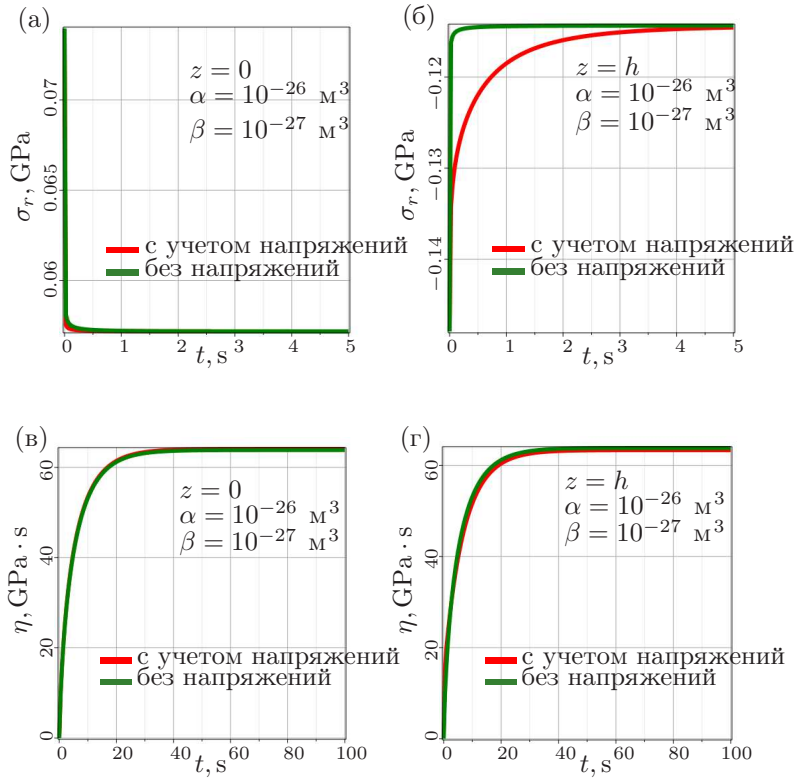


Рис. 5. Релаксация напряжения и зависимость вязкости от времени вдали от равновесия согласно модели, учитывающей и не учитывающей влияние напряжения на вязкость: (а), (в) – $z = 0$; (б), (г) – $z = h$

Для структуры вдали от равновесия на срединной плоскости учет напряжений в модели вязкости является более существенным на малых временах. Растягивающее напряжение σ_r релаксирует быстрее (рис. 5 (а)). Вязкость при этом релаксирует к тому же равновесному значению (рис. 5 (в)). На поверхности диска сжимающее напряжение σ_r релаксирует медленнее при использовании модели вязкости с учетом напряжений, чем при использовании МАР-модели, так как учет знака напряже-

ния в модели (12) через линейную зависимость от первого инварианта тензора напряжений увеличивает энергетический барьер, когда напряжения сжимающие (рис. 5 (б)), однако это влияние также наиболее существенно на малых временах, поэтому вязкость релаксирует к тому же равновесному значению (рис. 5 (г)).

Заключение

Развита модель, учитывающая одновременное влияние напряжений и фиктивной температуры на вязкость. На примере решения задачи о релаксации температурных напряжений в пластине с вязкостью, зависящей от напряжения и фиктивной температуры, показано, что:

- Учет влияния напряжений на вязкость наиболее важен, когда структура близка к равновесному состоянию;
- Вдали от равновесия учет влияния напряжений на вязкость существенен на малых временах;
- Растяжение может ускорять релаксацию напряжения, а сжатие – замедлять.

Благодарности. Авторы выражают благодарность Д. Аллану и К. Корешкову за обсуждение постановки задач и результатов работы. Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования РФ (№ 121112500318-1).

Литература

1. *Kao D.-B., McVittie J.P., Nix W.D., Saraswat K.C.* Two-dimensional thermal oxidation of silicon. II. Modeling stress effects in wet oxides // IEEE Trans. Electron Devices. 1988. V. 35, No 1. P. 25–37. <https://doi.org/10.1109/16.2412>.
2. *McDowell M.T., Lee S.W., Nix W.D., Cui Y.* 25th anniversary article: Understanding the lithiation of silicon and other alloying anodes for lithium-ion batteries // Adv. Mater. 2004. V. 25, No 36. P. 4966–4984. <https://doi.org/10.1002/adma.201301795>.
3. *Poluektov M., Freidin A.B., Figiel L.* Modelling stress-affected chemical reactions in non-linear viscoelastic solids with application to lithiation reaction in spherical Si particles // Int. J. Eng. Sci. 2018. V. 128. P. 44–62. <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2018.03.007>.
4. *Мазурин О.В., Рехсон С.М., Старцев Ю.К.* О роли вязкости при расчете релаксации свойств стекла в интервале стеклования // Физ. хим. стекла. 1975. Т. 1, № 5. С. 438–442.
5. *Narayanaswamy O.S.* A model of structural relaxation in glass // J. Am. Ceram. Soc. 1971. V. 54, No 10. P. 491–498. <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1971.tb12186.x>.
6. *Mazurin O.V., Kluyev V.P., Stolyar S.V.* Temperature dependences of structural relaxation times at constant fictive temperatures in oxide glasses // Glastechn. Ber. 1983. V. 56, No 2. P. 1148–1153.
7. *Mauro J.C., Allan D.C., Potuzak M.* Nonequilibrium viscosity of glass // Phys. Rev. B. 2009. V. 80, No 9. Art. 094204. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.094204>.
8. *Старцев Ю.К.* Некоторые области применения стекол, ожидающие исследователей (по материалам открытых публикаций) // Стекло: наука и практика (GLASSP2021). Сб. тез. Третьей Рос. конф. с междунар. участ. Ин-т химии силикатов им. И.В. Гребенщикова РАН. 2021. С. 40–41.
9. *Ellison A.J., Cornejo I.A.* Glass substrates for liquid crystal displays // Int. J. Appl. Glass Sci. 2010. V. 1, No 1. P. 87–103. <https://doi.org/10.1111/j.2041-1294.2010.00009.x>.

10. *Старцев Ю.К.* Стекла в дисплеях. Требования, особенности технологии, моделирование свойств. СПб: СПбГТИ (ТУ), 2008. 134 С.
11. *Zheng Q., Mauro J.C.* Variability in the relaxation behavior of glass: Impact of thermal history fluctuations and fragility // *J. Chem. Phys.* 2017. V. 146, No 7. Art. 074504. <https://doi.org/10.1063/1.4975760>.
12. *Бумаев А.М.* Прочность стекла. Ионообменное упрочнение. Махачкала, 1997. 249 С.
13. *Varshneya A.K.* Chemical strengthening of glass: Lessons learned and yet to be learned // *Int. J. Appl. Glass Sci.* 2010. V. 1, No 2. P. 131–142. <https://doi.org/10.1111/j.2041-1294.2010.00010.x>.
14. *Старцев Ю.К., Баханов В.А., Вострикова М.С.* Исследование особенностей релаксационных процессов в ионообмененных слоях промышленных стекол // Тез. докл. III Чехословацко-Советск. симп. по строению и свойствам силикатных и оксидных систем. Братислава, 1986. С. 102–104.
15. *Мазурин О.В., Старцев Ю.К., Кмеев В.П.* О структурной релаксации в ионообмененных стеклах // В кн.: Тез. докл. Всес. симп. «Релаксационные явления в неорганических стеклах». Тбилиси, 1984. С. 25–26.
16. *Startsev Yu.K.* Influence of structural relaxation on changes in properties of ion-exchanged glasses // *XIVth Int. Congr. Glass. New Delhi.* 1986. V. 2. P. 363–369.
17. *Fu A.I., Mauro J.C.* Mutual diffusivity, network dilation, and salt bath poisoning effects in ion-exchanged glass // *J. Non-Cryst. Solids.* 2013. V. 363. P. 199–204. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2012.12.037>.
18. *Chizhik S.A., Sidel'nikov A.A.* Kinetics of solid state reactions with a positive feedback between the reaction and fracture. 2. The kinetics of ion exchange in an alkaline-silicate glass // *Russ. Chem. Bull.* 1998. V. 47, No 4. P. 610–614. <https://doi.org/10.1007/BF02495963>.
19. *Chizhik S.A., Sidel'nikov A.A.* Kinetics of the $Na^+ \rightarrow Li^+$ ion exchange in alkali silicate glass // *Glass Phys. Chem.* 2000. V. 26, No 3. P. 280–286. <https://doi.org/10.1007/BF02738298>.
20. *Chizhik S.A., Sidel'nikov A.A.* The kinetics of solid state reactions accompanied by fracture: I. Reaction of ion exchange in lime-soda glass // *Solid State Ionics.* 2007. V. 178, No 23–24. P. 1344–1352. <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2007.07.011>.
21. *Mauro J.C., Ellison A.J., Pye L.D.* Glass: The nanotechnology connection // *Int. J. Appl. Glass Sci.* 2013. V. 4, No 2. P. 64–75. <https://doi.org/10.1111/ijag.12030>.
22. *Mauro J.C., Tandia A., Vargheese K.D., Mauro Y.Z., Smedskjaer M.M.* Accelerating the design of functional glasses through modeling // *Chem. Mater.* 2016. V. 28, No 12. P. 4267–4277. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.6b01054>.
23. *Mauro J.C.* Decoding the glass genome // *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.* 2018. V. 22, No 2. P. 58–64. <https://doi.org/10.1016/j.cossms.2017.09.001>.
24. *Tsujikawa K., Tajima K., Zhou J.* Intrinsic loss of optical fibers // *Opt. Fiber Technol.* 2005. V. 11, No 4. P. 319–331. <https://doi.org/10.1016/j.yofte.2005.04.003>.
25. *Mauro J.C., Soyer Uzun S., Bras W., Sen S.* Nonmonotonic evolution of density fluctuations during glass relaxation // *Phys. Rev. Lett.* 2009. V. 102. Art. 155506. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.155506>.
26. *Mauro J.C.* Effect of fragility on relaxation of density fluctuations in glass // *J. Non-Cryst. Solids.* 2011. V. 357, No 19–20. P. 3520–3543. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2011.06.028>.

27. Рейнер М. Реология. М: Наука, 1965. 224 С.
28. Мазурин О.В. Стеклование. Л: Наука, 1986. 158 С.
29. Таганцев Д.К. Стеклообразные материалы: учебное пособие. СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2010. 204 С.
30. Tool A.Q. Relation between inelastic deformability and thermal expansion of glass in its annealing range // J. Am. Ceram. Soc. 1946. V. 29, No 9. P. 240–253. <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1946.tb11592.x>.
31. Mauro J.C., Yue Y., Ellison A.J., Gupta P.K., Allan D.C. Viscosity of glass-forming liquids // Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A. 2009. V. 106, No 47. P. 19780–19784. <https://doi.org/10.1073/pnas.0911705106>.
32. Ritland H.N. Limitations of the fictive temperature concept // J. Am. Ceram. Soc. 1956. V. 39, No 12. P. 403–406. <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1956.tb15613.x>.
33. Mauro J.C., Mauro Y.Z. On the Prony series representation of stretched exponential relaxation // Phys. A: Stat. Mech. Appl. 2018. V. 506. P. 75–87. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.04.047>.
34. Phillips J.C. Kohlrausch explained: The solution to a problem that is 150 years old // J. Stat. Phys. 1994. V. 77, No 3–4. P. 945–947. <https://doi.org/10.1007/BF02179472>.
35. Phillips J.C. Stretched exponential relaxation in molecular and electronic glasses // Rep. Prog. Phys. 1996. V. 59. P. 1133–1207. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/59/9/003>.
36. Fotheringham U., Muller R., Erb K., Baltes A., Siebers F., Weiß E., Dudek R. Evaluation of the calorimetric glass transition of glasses and glass ceramics with respect to structural relaxation and dimensional stability // Thermochim. Acta. 2007. V. 461, No 1–2. P. 72–81. <https://doi.org/10.1016/j.tca.2007.06.007>.

Поступила в редакцию 30.06.2023

Принята к публикации 5.09.2023

Карасева Ульяна Павловна, аспирант, стажер-исследователь лаборатории математических методов механики материалов Института проблем машиноведения РАН

Институт проблем машиноведения РАН

Большой просп. Васильевского острова, д. 61, г. Санкт-Петербург, 199178, Россия

E-mail: u.p.karaseva@gmail.com

Фрейдin Александр Борисович, доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник, заведующий лабораторией математических методов механики материалов Института проблем машиноведения РАН

Институт проблем машиноведения РАН

Большой просп. Васильевского острова, д. 61, г. Санкт-Петербург, 199178, Россия

E-mail: alexander.freidin@gmail.com

UCHENYE ZAPISKI KAZANSKOGO UNIVERSITETA.
SERIYA FIZIKO-MATEMATICHESKIE NAUKI
(Proceedings of Kazan University. Physics and Mathematics Series)
2023, vol. 165, no. 3, pp. 219–235

ORIGINAL ARTICLE

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.219-235

On the Effect of Stress on the Nonequilibrium Viscosity of Glasses

U.P. Karaseva*, A.B. Freidin**

*Institute for Problems in Mechanical Engineering,
Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, 199178 Russia*
E-mail: *u.p.karaseva@gmail.com, **alexander.freidin@gmail.com

Received June 30, 2023; Accepted September 5, 2023

Abstract

Two processes related to the relaxation of a glassy material's structure were discussed. One entails stress relaxation, while the other involves the relaxation of the structure to its equilibrium state following the stress relief and is described by the change of fictive temperature. Both processes affect the viscosity coefficient. The nonequilibrium viscosity model was analyzed with account of these relaxation processes. The importance of considering stresses when modeling the viscoelastic behavior of glassy materials was showcased by solving the problem of stress relaxation in a plate under thermal stresses.

Keywords: stress relaxation, viscosity models, fictive temperature, nonequilibrium structure, thermal stresses

Acknowledgments. We thank D. Allan and K. Koreshkov for their fruitful discussions on the problems and results of the research. This study was performed as part of the state assignment of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project no. 121112500318-1).

Figure Captions

Fig. 1. Standard model of a viscoelastic material.

Fig. 2. Graphical method for determining the fictive temperature T_f . EE – equilibrium dependence of the property. GG – dependence of the property characteristic of the substance in the glassy state [28].

Fig. 3. Thin disk.

Fig. 4. Stress relaxation and time-viscosity relation in a near-equilibrium structure according to the model with and without considering the stress effect on viscosity: (a), (c) – $z = 0$; (b), (d) – $z = h$.

Fig. 5. Stress relaxation and time-viscosity relation in a nonequilibrium structure according to the model with and without considering the stress effect on viscosity: (a), (c) – $z = 0$; (b), (d) – $z = h$.

References

1. Kao D.-B., McVittie J.P., Nix W.D., Saraswat K.C. Two-dimensional thermal oxidation of silicon. II. Modeling stress effects in wet oxides. *IEEE Trans. Electron Devices*, 1988, vol. 35, no. 1, pp. 25–37. <https://doi.org/10.1109/16.2412>.
2. McDowell M.T., Lee S.W., Nix W.D., Cui Y. 25th anniversary article: Understanding the lithiation of silicon and other alloying anodes for lithium-ion batteries. *Adv. Mater.*, 2004, vol. 25, no. 36, pp. 4966–4984. <https://doi.org/10.1002/adma.201301795>.
3. Poluektov M., Freidin A.B., Figiel L. Modelling stress-affected chemical reactions in non-linear viscoelastic solids with application to lithiation reaction in spherical Si particles. *Int. J. Eng., Sci.*, 2018, vol. 128, pp. 44–62. <https://doi.org/10.1016/j.ijengsci.2018.03.007>.
4. Mazurin O.V., Rekhson S.M., Startsev Yu.K. On the role of the viscosity in calculation of glass properties in glass transition range. *Fiz. Khim. Stekla*, 1975, vol. 1, no. 5, pp. 438–442. (In Russian)
5. Narayanaswamy O.S. A model of structural relaxation in glass. *J. Am. Ceram. Soc.*, 1971, vol. 54, no. 10, pp. 491–498. <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1971.tb12186.x>.
6. Mazurin O.V., Kluyev V.P., Stolyar S.V. Temperature dependences of structural relaxation times at constant fictive temperatures in oxide glasses. *Glastech. Ber.*, 1983, vol. 56, no. 2, pp. 1148–1153.
7. Mauro J.C., Allan D.C., Potuzak M. Nonequilibrium viscosity of glass. *Phys. Rev. B*, 2009, vol. 80, no. 9, art. 094204. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.80.094204>.
8. Startsev Yu.K. Potential glass applications awaiting further exploration (based on open-access publications). *Steklo: nauka i praktika (GLASSP2021). Sb. tez. Tret'ei Ros. konf. s mezhdunar. uchast.* [Glass: Science and Practice (GLASSP2021). Proc. 3rd Russ. Conf. with Int. Participation]. Inst. Khim. Silik. im. I.V. Grebenshchikova, Ross. Akad. Nauk, 2021, pp. 40–41. (In Russian)
9. Ellison A.J., Cornejo I.A. Glass substrates for liquid crystal displays. *Int. J. Appl. Glass Sci.*, 2010, vol. 1, no. 1, pp. 87–103. <https://doi.org/10.1111/j.2041-1294.2010.00009.x>.
10. Startsev Yu.K. *Stekla v displayakh. Trebovaniya, osobennosti tekhnologii, modelirovanie svoistv* [Glass in Displays. Requirements, Technology, and Simulation of Properties]. St. Petersburg, SPbGTI (TU), 2008. 134 p. (In Russian)
11. Zheng Q., Mauro J.C. Variability in the relaxation behavior of glass: Impact of thermal history fluctuations and fragility. *J. Chem. Phys.*, 2017, vol. 146, no. 7, art. 074504. <https://doi.org/10.1063/1.4975760>.
12. Butaev A.M. *Prochnost' stekla. Ionoobmennoe uprochnenie* [Strength of Glass. Ion-Exchange Hardening]. Makhachkala, 1997. 249 p. (In Russian)
13. Varshneya A.K. Chemical strengthening of glass: Lessons learned and yet to be learned. *Int. J. Appl. Glass Sci.*, 2010, vol. 1, no. 2, pp. 131–142. <https://doi.org/10.1111/j.2041-1294.2010.00010.x>.
14. Startsev Yu.K., Bakhanov V.A., Vostrikova M.S. Relaxation processes in ion-exchange layers of industrial glasses. *Tez. dokl. III Chekhoslovatsko-Sovetsk. simp. po stroeniyu i svoistvam sikikatnykh i oksidnykh sistem* [Proc. III Czechoslovak-Soviet Symp. on Structure and Properties of Silicate and Oxide Systems]. Bratislava, 1986, pp. 102–104. (In Russian)
15. Mazurin O.V., Startsev Yu.K., Klyuev V.P. On structural relaxation in ion-exchange glasses. *Tez. dokl. Vses. simp. "Relaksatsionnye yavleniya v neorganicheskikh steklakh"* [Proc. All-Union Symp. "Relaxation Phenomena in Inorganic Glasses"]. Tbilisi, 1984, pp. 25–26. (In Russian)

16. Startsev Yu.K. Influence of structural relaxation on changes in properties of ion-exchanged glasses. *XIVth Int. Congr. Glass*. Vol. 2. New Delhi, 1986, pp. 363–369.
17. Fu A.I., Mauro J.C. Mutual diffusivity, network dilation, and salt bath poisoning effects in ion-exchanged glass. *J. Non-Cryst. Solids*, 2013, vol. 363, pp. 199–204. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2012.12.037>.
18. Chizhik S.A., Sidel'nikov A.A. Kinetics of solid state reactions with a positive feedback between the reaction and fracture. 2. The kinetics of ion exchange in an alkaline-silicate glass. *Russ. Chem. Bull.*, 1998, vol. 47, no. 4, pp. 610–614. <https://doi.org/10.1007/BF02495963>.
19. Chizhik S.A., Sidel'nikov A.A. Kinetics of the $Na^+ \rightarrow Li^+$ ion exchange in alkali silicate glass. *Glass Phys. Chem.*, 2000, vol. 26, no. 3, pp. 280–286. <https://doi.org/10.1007/BF02738298>.
20. Chizhik S.A., Sidel'nikov A.A. The kinetics of solid state reactions accompanied by fracture: I. Reaction of ion exchange in lime-soda glass. *Solid State Ionics*, 2007, vol. 178, nos. 23–24, pp. 1344–1352. <https://doi.org/10.1016/j.ssi.2007.07.011>.
21. Mauro J.C., Ellison A.J., Pye L.D. Glass: The nanotechnology connection. *Int. J. Appl. Glass Sci.*, 2013, vol. 4, no. 2, pp. 64–75. <https://doi.org/10.1111/ijag.12030>.
22. Mauro J.C., Tandia A., Vargheese K.D., Mauro Y.Z., Smedskjaer M.M. Accelerating the design of functional glasses through modeling. *Chem. Mater.*, 2016, vol. 28, no. 12, pp. 4267–4277. <https://doi.org/10.1021/acs.chemmater.6b01054>.
23. Mauro J.C. Decoding the glass genome. *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.*, 2018, vol. 22, no. 2, pp. 58–64. <https://doi.org/10.1016/j.cossms.2017.09.001>.
24. Tsujikawa K., Tajima K., Zhou J. Intrinsic loss of optical fibers. *Opt. Fiber Technol.*, 2005, vol. 11, no. 4, pp. 319–331. <https://doi.org/10.1016/j.yofte.2005.04.003>.
25. Mauro J.C., Soyer Uzun S., Bras W., Sen S. Nonmonotonic evolution of density fluctuations during glass relaxation. *Phys. Rev. Lett.*, 2009, vol. 102, art. 155506. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.155506>.
26. Mauro J.C. Effect of fragility on relaxation of density fluctuations in glass. *J. Non-Cryst. Solids*, 2011, vol. 357, nos. 19–20, pp. 3520–3543. <https://doi.org/10.1016/j.jnoncrysol.2011.06.028>.
27. Reiner M. *Reologiya* [Rheology]. Moscow, Nauka, 1965. 224 p. (In Russian)
28. Mazurin O.V. *Steklovanie* [Glass Transition]. Leningrad, Nauka, 1986. 158 p. (In Russian)
29. Tagantsev D.K. *Stekloobraznye materialy: uchebnoe posobie* [Glassy Materials: A Text-book]. St. Petersburg, Izd. Politekh. Univ., 2010. 204 p. (In Russian)
30. Tool A.Q. Relation between inelastic deformability and thermal expansion of glass in its annealing range. *J. Am. Ceram. Soc.*, 1946, vol. 29, no. 9, pp. 240–253. <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1946.tb11592.x>.
31. Mauro J.C., Yue Y., Ellison A.J., Gupta P.K., Allan D.C. Viscosity of glass-forming liquids. *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.*, 2009, vol. 106, no. 47, pp. 19780–19784. <https://doi.org/10.1073/pnas.0911705106>.
32. Ritland H.N. Limitations of the fictive temperature concept. *J. Am. Ceram. Soc.*, 1956, vol. 39, no. 12, pp. 403–406. <https://doi.org/10.1111/j.1151-2916.1956.tb15613.x>.
33. Mauro J.C., Mauro Y.Z. On the Prony series representation of stretched exponential relaxation. *Phys. A: Stat. Mech. Appl.*, 2018, vol. 506, pp. 75–87. <https://doi.org/10.1016/j.physa.2018.04.047>.

-
34. Phillips J.C. Kohlrausch explained: The solution to a problem that is 150 years old. *J. Stat. Phys.*, 1994, vol. 77, nos. 3–4, pp. 945–947. <https://doi.org/10.1007/BF02179472>.
 35. Phillips J.C. Stretched exponential relaxation in molecular and electronic glasses. *Rep. Prog. Phys.*, 1996, vol. 59, pp. 1133–1207. <https://doi.org/10.1088/0034-4885/59/9/003>.
 36. Fotheringham U., Muller R., Erb K., Baltes A., Siebers F., Weiß E., Dudek R. Evaluation of the calorimetric glass transition of glasses and glass ceramics with respect to structural relaxation and dimensional stability. *Thermochim. Acta*, 2007, vol. 461, nos. 1–2, pp. 72–81. <https://doi.org/10.1016/j.tca.2007.06.007>.
-

⟨ **Для цитирования:** Карасева У.П., Фрейдin А.Б. О влиянии напряжений на неравновесную вязкость стекол // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. 2023. Т. 165, кн. 3. С. 219–235. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.219-235>. ⟩

⟨ **For citation:** Karaseva U.P., Freidin A.B. On the effect of stress on the nonequilibrium viscosity of glasses. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2023, vol. 165, no. 3, pp. 219–235. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.219-235>. (In Russian) ⟩

ОРИГИНАЛЬНАЯ СТАТЬЯ

УДК 539.3

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.236-245

ЗАДАЧА ТИПА СТЕФАНА В КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛАХ С ПРОИЗВОЛЬНЫМ ЧИСЛОМ ПОДВИЖНЫХ ГРАНИЦ ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ

Ек. Л. Кузнецова¹, С. И. Жаворонок²

¹*Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), г. Москва, 125993, Россия*

²*Институт прикладной механики Российской академии наук, г. Москва, 125040, Россия*

Аннотация

Решена задача о теплопереносе в полубесконечных телах при наличии произвольного числа нестационарно подвижных границ фазовых превращений. Такие задачи возникают при высокотемпературном нагреве композиционных материалов, когда происходит разложение (деструкция) связующих с образованием подвижных границ начала и окончания фазовых превращений, границ уноса массы и т. д. Получено аналитическое решение задачи типа Стефана при произвольном числе нестационарно подвижных границ и подробно исследован теплоперенос при наличии двух подвижных границ.

Ключевые слова: теплоперенос, задача Стефана, подвижная граница, композиционный материал, разложение связующих, аналитическое решение

Введение

При высокотемпературном нагреве конструкций, изготовленных из композиционных материалов, например, тепловой защиты высокоскоростных летательных аппаратов из композиционных материалов, интенсивном нагреве композитов локальными источниками [1–6] возникают области разложения связующих, ограниченных подвижными границами начала и окончания разложения. При этом может появиться наружная подвижная граница уноса массы под воздействием высокотемпературного газодинамического потока, и необходимо находить решения в условиях произвольного числа подвижных границ фазовых превращений [7–9].

При циклическом нагреве, когда тепловые пики, сопровождающиеся фазовыми превращениями, сменяются тепловыми спадами без фазовых превращений, может возникать значительное число подвижных границ.

Известно значительное число физико-химических процессов, в которых под воздействием тепловых источников возникают нестационарно подвижные границы фазовых превращений, положения которых заранее определить невозможно, а можно определить только после нахождения поля температур, используя так называемые условия Стефана на данных границах – равенство разности тепловых потоков на подвижных границах тепловому эффекту фазовых превращений, а также условие непрерывности температур [10].

Ниже аналитически решена задача типа Стефана об определении теплового состояния в полубесконечной области с произвольным числом подвижных границ

фазовых превращений. В основу решения положены следующие предположения: газообразные компоненты на подвижных границах отсутствуют; подвижные границы не пересекаются; скорость движения границ положительна; температуры, тепловые эффекты и теплофизические характеристики постоянны.

1. Постановка задачи

Рассмотрим задачу теории теплопроводности в многослойной конструкции, каждый слой которой ограничен двумя нестационарно подвижными границами фазовых превращений. При этом под номером 1 находится полубесконечный слой исходной фазы, ограниченной подвижной границей $x_1^*(t)$, причем наружный слой, примыкающий к границе $w1$, ограничен снаружи неподвижной границей с температурой T_{w1} , а изнутри – подвижной границей $x_{n-1}^*(t)$.

$$\frac{\partial^2 T_n}{\partial x^2} - \frac{1}{a_n} \frac{\partial T_n}{\partial t} = 0, \quad 0 < x < X_{n-1}^*(t), \quad t > 0; \quad (1)$$

$$\frac{\partial^2 T_s}{\partial x^2} - \frac{1}{a_s} \frac{\partial T_s}{\partial t} = 0, \quad x_s^*(t) < x < x_{s-1}^*(t), \quad t > 0, \quad s = 2, \dots, n-1; \quad (2)$$

$$\frac{\partial^2 T_1}{\partial x^2} - \frac{1}{a_1} \frac{\partial T_1}{\partial t} = 0, \quad x_1^*(t) < x < \infty, \quad t > 0; \quad (3)$$

$$-\lambda_s \frac{\partial T_s}{\partial x} \Big|_{x=x_s^*(t)-0} + \lambda_{s-1} \frac{\partial T_{s-1}}{\partial x} \Big|_{x=x_{s-1}^*(t)+0} = Q_{s-1}^* \rho_{s-1} \dot{x}_{s-1}^*(t),$$

$$x = x_{s-1}^*(t), \quad t > 0, \quad s = 2, \dots, n; \quad (4)$$

$$T_s|_{x=x_s^*(t)-0} = T_{s-1}|_{x=x_{s-1}^*(t)+0} = T_{s-1}^*, \quad x = x_{s-1}^*(t), \quad t > 0, \quad s = 2, \dots, n; \quad (5)$$

$$T(0, t) = T_{w1}, \quad x = 0, \quad t > 0; \quad (6)$$

$$T(\infty, t) = T_0, \quad x = \infty, \quad t \geq 0; \quad (7)$$

$$T(x, 0) = T_0, \quad x \in (0, \infty), \quad t = 0; \quad (8)$$

$$x_s^*(0) = 0, \quad s = \overline{1, n-1}, \quad t = 0. \quad (9)$$

В задаче (1)–(8) условия (4), (5) – краевые условия Стефана на подвижных границах. Наружная граница $w1$ с температурой T_{w1} (6) может также рассматриваться подвижной под действием конвективно-кондуктивных тепловых потоков. Однако, чтобы не загромождать выкладки, будем далее считать границу $w1$ ($x = 0$) неподвижной.

Задача (1)–(9) нелинейна, в чем можно убедиться, подставив уравнения (1)–(3) в краевые условия (4), (5). Здесь λ , c , ρ , a , T , Q – теплопроводность, теплоемкость, плотность, температуропроводность, температура, теплота фазовых превращений соответственно.

Решением задач теплопереноса (т. е. задач для уравнений (1)–(3)) с граничными условиями первого рода (5)–(7) будут функции [11]

$$T_1(x, t) = T_1^* \frac{1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{a_1 t}}\right)}{1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x_1^*(t)}{2\sqrt{a_1 t}}\right)} + T_0 \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{a_1 t}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x_1^*(t)}{2\sqrt{a_1 t}}\right)}{1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x_1^*(t)}{2\sqrt{a_1 t}}\right)}, \quad (10)$$

$$x_1^*(t) < x < \infty, \quad t > 0;$$

$$T_s(x, t) = \frac{T_{s-1}^* \operatorname{erf}\left(\frac{x_s^*(t)}{2\sqrt{a_s t}}\right) - T_s^* \operatorname{erf}\left(\frac{x_{s-1}^*(t)}{2\sqrt{a_s t}}\right) + (T_s^* - T_{s-1}^*) \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{a_s t}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\frac{x_s^*(t)}{2\sqrt{a_s t}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x_{s-1}^*(t)}{2\sqrt{a_s t}}\right)}, \quad (11)$$

$$x_s^*(t) < x < x_{s-1}^*(t), \quad t > 0, \quad s = \overline{2, n-1};$$

$$T_n(x, t) = T_{w1} - (T_{w1} - T_{n-1}^*) \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{a_n t}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\frac{x_{n-1}^*(t)}{2\sqrt{a_n t}}\right)}, \quad 0 < x < x_{n-1}^*(t), \quad t > 0. \quad (12)$$

В зависимостях (10)–(12) координаты $x_s^*(t)$, $s = \overline{1, n-1}$, подвижных границ неизвестны. Для определения координат каждой границы имеем два крайевых условия стефановского типа (4), (5) (всего $2n-2$ крайевых условия). Из представления решений (10)–(12) ясно, что зависимости $x_s^*(t)$, $s = \overline{1, n-1}$, должны быть пропорциональны $\sqrt{a_s t}$, т. е.

$$x_s^*(t) = 2\chi_s \sqrt{a_s t}, \quad s = \overline{1, n-1}, \quad (13)$$

причем, поскольку $x_{s-1}^*(t) > x_s^*(t)$, для любых моментов времени постоянные $\chi_{s-1} > \chi_s$. В этом случае решения (10)–(12) с учетом (13) примут форму

$$T_1(x, t, \chi_1) = T_1^* \frac{1 - \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{a_1 t}}\right)}{1 - \operatorname{erf}(\chi_1)} + T_0 \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{a_1 t}}\right) - \operatorname{erf}(\chi_1)}{1 - \operatorname{erf}(\chi_1)}, \quad (14)$$

$$x_1^*(t) < x < \infty, \quad t > 0;$$

$$T_s(x, t, \chi_{s-1}, \chi_s) = \frac{T_{s-1}^* \operatorname{erf}(\chi_s) - T_s^* \operatorname{erf}\left(\chi_s \sqrt{\frac{a_{s-1}}{a_s}}\right) + (T_s^* - T_{s-1}^*) \operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{a_s t}}\right)}{\operatorname{erf}(\chi_s) - \operatorname{erf}\left(\chi_{s-1} \sqrt{\frac{a_{s-1}}{a_s}}\right)}, \quad (15)$$

$$x_s^*(t) < x < x_{s-1}^*(t), \quad t > 0, \quad s = \overline{2, n-1};$$

$$T_n(x, t, \chi_{n-1}) = T_{w1} - (T_{w1} - T_{n-1}^*) \frac{\operatorname{erf}\left(\frac{x}{2\sqrt{a_n t}}\right)}{\operatorname{erf}\left(\chi_{n-1} \sqrt{\frac{a_{n-1}}{a_n}}\right)}, \quad (16)$$

$$0 < x < x_{n-1}^*(t), \quad t > 0.$$

Для определения коэффициентов χ_s , $s = \overline{1, n-1}$, подставим решения (14)–(16) в крайевые условия (4) и получим следующую систему из $n-1$ трансцендентных уравнений относительно χ_s , $s = \overline{1, n-1}$. Не теряя общности всего алгоритма, рассмотрим задачу (1)–(9) для $n=3$ с двумя нестационарно подвижными границами $x = x_1^*(t)$ и $x = x_2^*(t)$, для определения координат которых получим следующую систему из двух трансцендентных уравнений (качественная картина процесса представлена на рис. 1).

$$F_I(\chi_1, \chi_2) = E \frac{\exp\left(-\chi_1^2 \frac{a_1}{a_2}\right)}{\operatorname{erf}\left(\chi_1 \sqrt{\frac{a_1}{a_2}}\right) - \operatorname{erf}(\chi_2)} - F \frac{\exp(-\chi_1^2)}{1 - \operatorname{erf}(\chi_1)} - \chi_1 = 0, \quad (17)$$

$$F_{II}(\chi_1, \chi_2) = C \frac{\exp\left(-\chi_2^2 \frac{a_2}{a_3}\right)}{\operatorname{erf}\left(\chi_2 \sqrt{\frac{a_2}{a_3}}\right)} - D \frac{\exp(-\chi_2^2)}{\operatorname{erf}\left(\chi_1 \sqrt{\frac{a_1}{a_2}}\right) - \operatorname{erf}(\chi_2)} - \chi_2 = 0, \quad (18)$$

$$E = \sqrt{\frac{\lambda_2 c_2 \rho_2 c_1}{\pi \lambda_1 \rho_1}} \frac{T_2^* - T_1^*}{Q_1^*}; \quad F = \frac{c_1}{\sqrt{\pi}} \frac{T_1^* - T_0}{Q_1^*};$$

$$C = \sqrt{\frac{\lambda_3 c_3 \rho_3 c_2}{\pi \lambda_2 \rho_2}} \frac{T_{w1} - T_1^*}{Q_2^*}; \quad D = \frac{c_2}{\sqrt{\pi}} \frac{T_2^* - T_1^*}{Q_2^*}.$$

Поскольку $F_I(\chi_1, \chi_2)$, $F_{II}(\chi_1, \chi_2)$ – дифференцируемые функции, то для нахождения χ_1, χ_2 можно применить итерационный процесс Ньютона (при условии,

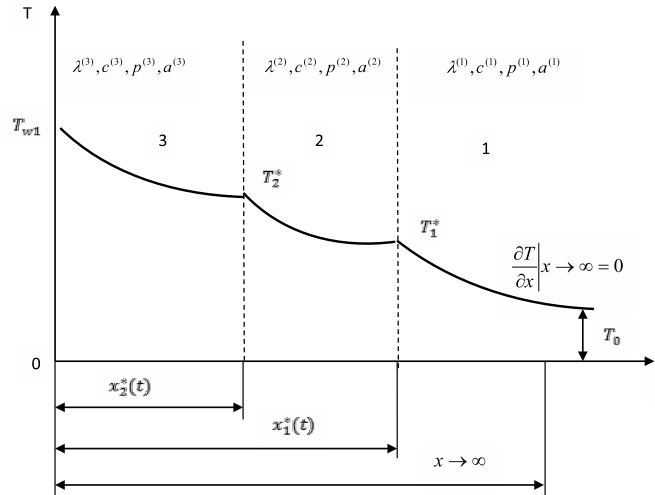


Рис. 1. Расчетная схема

что на каждой итерации якобиевы матрицы системы (17) и (18) невырождены). Однако для применения итерационных процедур необходимо найти начальное приближение вектора неизвестных $(\chi_1^{(0)}, \chi_2^{(0)})^T$. Для системы двух уравнений это можно сделать графически, построив кривые $F_I(\chi_1, \chi_2) = 0$, $F_{II}(\chi_1, \chi_2) = 0$ и найдя точку их пересечения; при этом каждую точку на плоскости $\chi_1 \chi_2$ для каждой из кривых необходимо находить итерационным методом из соответствующего уравнения (17) или (18). Найденную точку пересечения примем в качестве начального вектора $(\chi_1^{(0)}, \chi_2^{(0)})^T$, после чего используем итерационный процесс по уточнению χ_1 и χ_2 . Подставив далее найденные значения χ_1 , χ_2 и теплофизические характеристики в решения (13)–(16), получим нестационарное температурное поле в трех областях с двумя нестационарно подвижными границами, координаты которых определены в (13).

Сложность решения системы (17), (18) двух трансцендентных уравнений заключается в том, что компоненты матрицы Якоби

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial F_I(\chi_1, \chi_2)}{\partial \chi_1} & \frac{\partial F_I(\chi_1, \chi_2)}{\partial \chi_2} \\ \frac{\partial F_{II}(\chi_1, \chi_2)}{\partial \chi_1} & \frac{\partial F_{II}(\chi_1, \chi_2)}{\partial \chi_2} \end{bmatrix}$$

имеют очень большие значения производных в окрестности вектора-решения $(\chi_1, \chi_2)^T$, и незначительные колебания итерационных значений χ_1 , χ_2 приводят к значительным колебаниям элементов этой матрицы, что может увести расчеты от решения $(\chi_1, \chi_2)^T$ и приводить к аварийному останову. Поэтому компоненты начального вектора $(\chi_1^{(0)}, \chi_2^{(0)})^T$ необходимо вычислять с высокой точностью с отклонением от точного вектора $(\chi_1, \chi_2)^T$ в несколько процентов.

Для варьируемых значений Q_1^* , Q_2^* , T_1^* , T_2^* и следующей системы входных данных

$$\begin{aligned} \lambda_1 = \lambda_2 = \lambda_3 = \lambda = 0.001 \text{ kW/mK}; \quad c_1 = c_2 = c_3 = c = 1.5 \text{ kJ/kg} \cdot \text{K}; \\ \rho_1 = \rho_2 = \rho_3 = \rho = 2000 \text{ kg/m}^3; \quad a_1 = a_2 = a_3 = a = \frac{\lambda}{c\rho} = \frac{10^6}{3} \text{ m}^2/\text{s}; \end{aligned}$$

$T_0 = 300$ К; $T_{w1} = 2000$ К; $x_1^*(0) = 0$ м, $x_2^*(0) = 0$ м получены результаты решения задачи (1)–(9) в виде распределения температур и координат подвижных границ, представленных на рисунках 2–5.

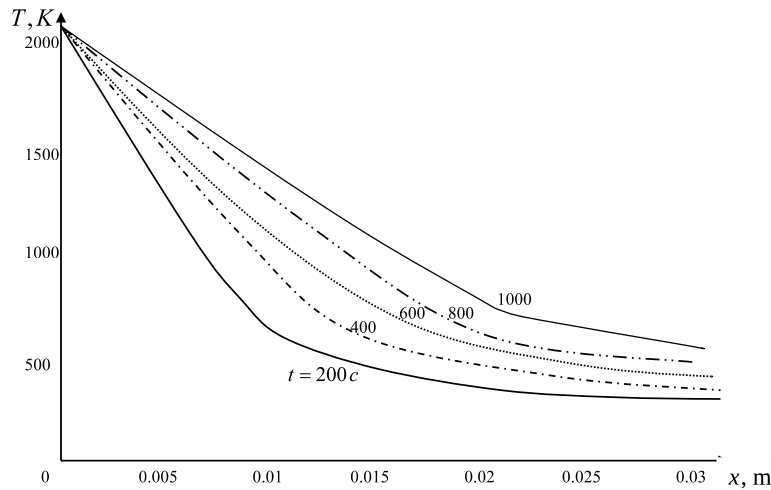


Рис. 2. Распределение температур в трех областях, ограниченных подвижными границами $Q = Q_1^* = Q_2^* = 1000$ кДж/кг, $T_1^* = 600$ К, $T_2^* = 900$ К

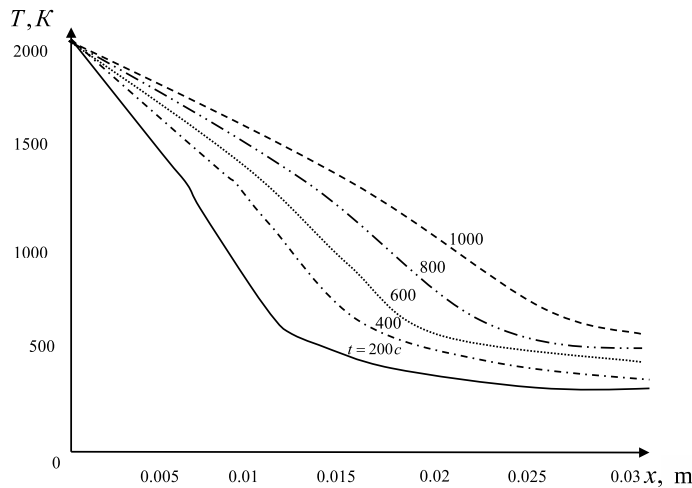


Рис. 3. Распределение температур в трех областях, ограниченных подвижными границами $Q = Q_1^* = Q_2^* = 1000$ кДж/кг, $T_1^* = 600$ К, $T_2^* = 1300$ К

На рисунках 2 и 3 представлены температурные поля в трех областях для случая различных температур T^* и T^{**} в различные моменты времени. На рисунках четко прослеживаются положения границ $x_1^*(t)$ и $x_2^*(t)$ по разрыву касательных к графикам функций, причем если разность $\Delta T^* = T_2^* - T_1^*$ мала ($\Delta T^* = 300$ К, рисунок 2), то профили температур находятся на более близком расстоянии друг от друга по сравнению со случаем $\Delta T^* = 700$ К на рисунке 3. При этом скорость

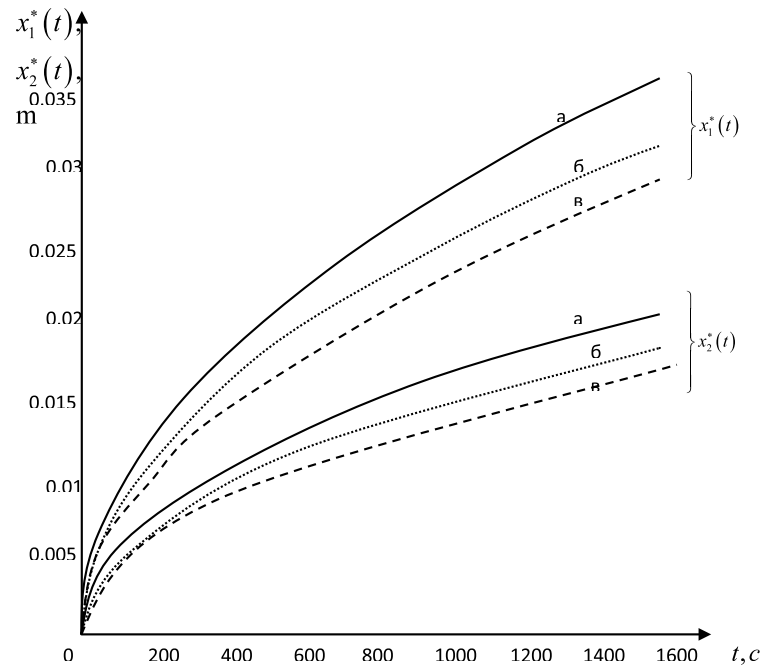


Рис. 4. Изменение координат нестационарно подвижных границ $x_1^*(t)$, $x_2^*(t)$ при $T_1^* = 600\text{K}$, $T_2^* = 1200\text{K}$: а) $Q = Q_1^* = Q_2^* = 600\text{ kJ/K}$; б) $Q = Q_1^* = Q_2^* = 1000\text{ kJ/K}$; в) $Q = Q_1^* = Q_2^* = 1400\text{ kJ/K}$

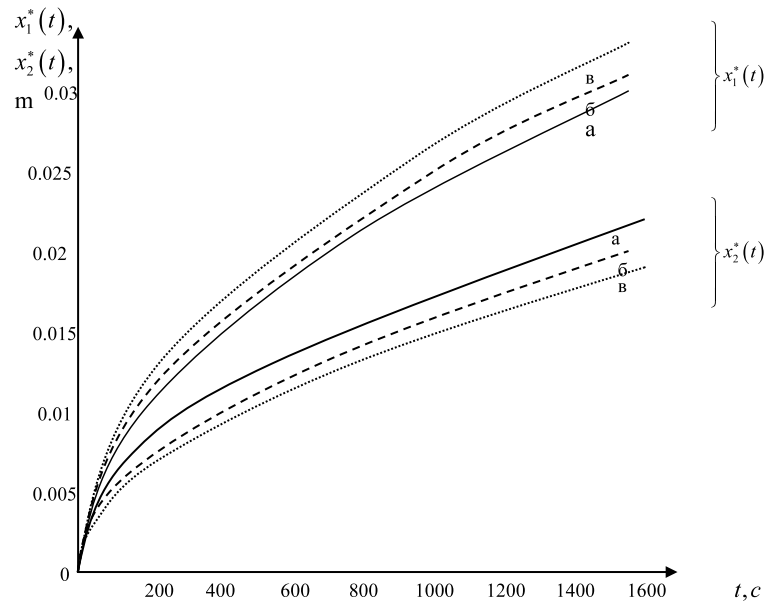


Рис. 5. Изменение координат нестационарно подвижных границ $x_1^*(t)$, $x_2^*(t)$ при а) $T_1^* = 600\text{K}$, $T_2^* = 900\text{K}$; б) $T_1^* = 600\text{K}$, $T_2^* = 1100\text{K}$; в) $T_1^* = 600\text{K}$, $T_2^* = 1300\text{K}$.

движения границ в существенной степени зависит от уровня температур T_1^* и T_2^* и теплоты фазовых превращений Q_1^* и Q_2^* .

На рисунках 4, 5 представлены координаты подвижных границ $x_1^*(t)$ и $x_2^*(t)$, причем на рисунке 4 приведены результаты при фиксированных T_1^* и T_2^* и варьируемых значениях $Q = Q_1^* = Q_2^*$, а на рисунке 5 – аналогичные результаты при фиксированном значении $Q = Q_1^* = Q_2^*$ и варьируемых значениях T_1^* и T_2^* . Из рисунков видно, что при фиксированных значениях T_1^* и T_2^* и монотонно возрастающих значениях $Q = Q_1^* = Q_2^*$ (рисунок 4) скорости движения границ $x_1^*(t)$ и $x_2^*(t)$ монотонно убывают.

Наоборот, при фиксированных значениях $Q = Q_1^* = Q_2^*$, T_1^* и монотонно возрастающих T_2^* (рис. 5) скорость движения границы $x_2^*(t)$ монотонно убывает, а скорость движения границы $x_1^*(t)$ монотонно возрастает (несмотря на то, что $T_1^* = 600 \text{ K} = \text{Const}$), что является неожиданным результатом.

2. Выводы

Поставлена и аналитически решена задача типа Стефана со многими нестационарно подвижными границами. Анализ полученных результатов показал, что температурные профили в точках $x_1^*(t)$ и $x_2^*(t)$ имеют изломы касательных в соответствии с условиями Стефана, а скорости движения границ в существенной степени влияют друг на друга.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (код проекта 23-19-00680).

Литература

1. Orekhov A., Rabinskiy L., Fedotenkov G. Analytical model of heating an isotropic half-space by a moving laser source with a Gaussian distribution // Symmetry. 2022. V. 14, No 4. Art. 650. <http://doi.org/10.3390/sym14040650>.
2. Fedotenkov G., Rabinskiy L., Lurie S. Conductive heat transfer in materials under intense heat flows // Symmetry. 2022. V. 14, No 9. Art. 1950. <https://doi.org/10.3390/sym14091950>.
3. Orekhov A.A., Rabinskiy L.N., Fedotenkov G.V., Hein T.Z. Heating of a half-space by a moving thermal laser pulse source // Lobachevskii J. Math. 2021. V. 42, No 8. P. 1912–1919. <http://doi.org/10.1134/s1995080221080229>.
4. Sha M., Rabinskiy L.N., Orekhov A.A. Impact of raindrop erosion on structural components // Russ. Eng. Res. 2023. V. 43, No 7. P. 834–837. <https://doi.org/10.3103/S1068798X23070195>.
5. Formalev V.F., Garibyan B.A., Orekhov A.A. Mathematical modeling of heat transfer in anisotropic half-space based on the generalized parabolic wave heat transfer equation // Lobachevskii J. Math. 2022. V. 43, No 7. P. 1842–1849. <https://doi.org/10.1134/S1995080222100110>.
6. Sha M., Volkov A.V., Orekhov A.A., Kuznetsova E.L. Micro-dilatation effects in a two-layered porous structure under uniform heating // J. Balk. Tribol. Assoc. 2021. V. 27, No 2. P. 280–294.
7. Формалев В.Ф., Колесник С.А., Миканев С.В. Моделирование теплового состояния композиционных материалов // ТВТ. 2003. Т. 41, № 6. С. 935–941.

8. Кузнецова Е.Л. Математическое моделирование тепломассопереноса в композиционных материалах при высокоинтенсивном нагреве. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. М.: МАИ, 2006. 138 с.
9. Формалев В.Ф., Кузнецова Е.Л. Многомерный теплоперенос при наличии фазовых переходов в анизотропных композиционных материалах // Мех. комп. матер. и констр. 2007. Т. 13, № 4. С. 129–141.
10. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. М.: Наука, 1964. 487 с.
11. Формалев В.Ф., Федотенков Г.В., Кузнецова Е.Л. Общий подход к моделированию теплового состояния композиционных материалов при высокотемпературном нагружении // Мех. комп. матер. и констр. 2006. Т. 12, № 1. С. 141–156.

Поступила в редакцию 30.08.2023

Принята к публикации 24.09.2023

Кузнецова Екатерина Львовна, доктор физико-математических наук, профессор, ведущий научный сотрудник НИО-9 ФГБОУ ВО «Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)»

Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет)

Волоколамское ш., д. 4, г. Москва, 125993, А-80, ГСП-3, Россия

E-mail: lareyna@mail.ru

Жаворонок Сергей Игоревич, кандидат физико-математических наук, ведущий научный сотрудник ФГБУН «Институт прикладной механики Российской академии наук»

Институт прикладной механики Российской академии наук

Ленинградский просп., д. 7, г. Москва, 125040, Россия

E-mail: zhavoronok@iam.ras.ru

ISSN 2541-7746 (Print)

ISSN 2500-2198 (Online)

UCHENYE ZAPISKI KAZANSKOGO UNIVERSITETA.
SERIYA FIZIKO-MATEMATICHESKIE NAUKI
(Proceedings of Kazan University. Physics and Mathematics Series)

2023, vol. 165, no. 3, pp. 236–245

ORIGINAL ARTICLE

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.236-245

A Stefan Problem for Composite Materials with an Arbitrary Number of Moving Phase-Transition Boundaries

E.L. Kuznetsova^{a}, S.I. Zhavoronok^{b**}*

^aMoscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, 125993 Russia

^bInstitute of Applied Mechanics, Russian Academy of Sciences, Moscow, 125040 Russia

E-mail: ^{*}lareyna@mail.ru, ^{**}zhavoronok@iam.ras.ru

Received August 30, 2023; Accepted September 24, 2023

Abstract

A Stefan problem of heat transfer in semi-infinite bodies with an arbitrary number of unsteady moving boundaries during phase transitions was solved. Such problems arise when composite materials are heated at high temperatures, causing the binding agents to decompose (destruct) thermally, which leads to the formation of moving boundaries in the onset and end of phase transitions, mass transfer, etc. An analytical solution of the Stefan problem with an

arbitrary number of unsteady moving boundaries was obtained. The heat transfer process with two moving boundaries was analyzed.

Keywords: heat transfer, Stefan problem, moving boundary, composite material, destruction of binding agents, analytical solution

Acknowledgments. This study was supported by the Russian Science Foundation (project no. 23-19-00680).

Figure Captions

Fig. 1. Computational scheme.

Fig. 2. Distribution of temperatures in three regions with moving boundaries $Q = Q_1^* = Q_2^* = 1000 \text{ kJ/kg}$, $T_1^* = 600\text{K}$, $T_2^* = 900\text{K}$.

Fig. 3. Distribution of temperatures in three regions with moving boundaries $Q = Q_1^* = Q_2^* = 1000 \text{ kJ/kg}$, $T_1^* = 600\text{K}$, $T_2^* = 1300\text{K}$.

Fig. 4. Shift in the coordinates of the unsteady moving boundaries $x_1^*(t)$, $x_2^*(t)$ at $T_1^* = 600\text{K}$, $T_2^* = 1200\text{K}$: a) $Q = Q_1^* = Q_2^* = 600 \text{ kJ/K}$; b) $Q = Q_1^* = Q_2^* = 1000 \text{ kJ/K}$; c) $Q = Q_1^* = Q_2^* = 1400 \text{ kJ/K}$.

Fig. 5. Shift in the coordinates of the unsteady moving boundaries $x_1^*(t)$, $x_2^*(t)$ at a) $T_1^* = 600\text{K}$, $T_2^* = 900\text{K}$; b) $T_1^* = 600\text{K}$, $T_2^* = 1100\text{K}$; c) $T_1^* = 600\text{K}$, $T_2^* = 1300\text{K}$.

References

1. Orekhov A., Rabinskiy L., Fedotenkov G. Analytical model of heating an isotropic half-space by a moving laser source with a Gaussian distribution. *Symmetry*, 2022, vol. 14, no. 4, art. 650. <http://doi.org/10.3390/sym14040650>.
2. Fedotenkov G., Rabinskiy L., Lurie S. Conductive heat transfer in materials under intense heat flows. *Symmetry*, 2022, vol. 14, no. 9, art. 1950. <https://doi.org/10.3390/sym14091950>.
3. Orekhov A.A., Rabinskiy L.N., Fedotenkov G.V., Hein T.Z. Heating of a half-space by a moving thermal laser pulse source. *Lobachevskii J. Math.*, 2021, vol. 42, no. 8, pp. 1912–1919. <http://doi.org/10.1134/s1995080221080229>.
4. Sha M., Rabinskiy L.N., Orekhov A.A. Impact of raindrop erosion on structural components. *Russ. Eng. Res.*, 2023, vol. 43, no. 7, pp. 834–837. <https://doi.org/10.3103/S1068798X23070195>.
5. Formalev V.F., Garibyan B.A., Orekhov A.A. Mathematical modeling of heat transfer in anisotropic half-space based on the generalized parabolic wave heat transfer equation. *Lobachevskii J. Math.*, 2022, vol. 43, no. 7, pp. 1842–1849. <https://doi.org/10.1134/S1995080222100110>.
6. Sha M., Volkov A.V., Orekhov A.A., Kuznetsova E.L. Micro-dilatation effects in a two-layered porous structure under uniform heating. *J. Balk. Tribol. Assoc.*, 2021, vol. 27, no. 2, pp. 280–294.
7. Formalev V.F., Kolesnik S.A., Mikanev S.V. Simulation of the thermal state of composite materials. *High Temp.*, vol. 41, no. 6, pp. 832–838. <https://doi.org/10.1023/B:HITE.0000008341.27025.54>.
8. Kuznetsova E.L. Mathematical modeling of heat and mass transfer in composite materials during high-temperature exposure. *Cand. Phys.-Math. Sci. Diss.* Moscow, MAI, 2006. 138 p. (In Russian)
9. Formalev V.F., Kuznetsova E.L. Multidimensional heat transfer with phase transition in anisotropic composite materials. *Mekh. Kompoz. Mater. Konstr.*, vol. 13, no. 4, pp. 129–141. (In Russian)

-
10. Carslaw H., Jaeger J. *Teploprovodnost' tverdykh tel* [Conduction of Heat in Solids]. Moscow, Nauka, 1964. 487 p. (In Russian)
 11. Formalev V.F., Fedotenkov G.V., Kuznetsova E.L. A general approach to simulation of the thermal state of composite materials under high temperature loading. *Mekh. Kompoz. Mater. Konstr.*, 2006, vol. 12, no. 1, pp. 141–156. (In Russian)
-

Для цитирования: Кузнецова Е.Л., Жаворонок С.И. Задача типа Стефана в композиционных материалах с произвольным числом подвижных границ фазовых превращений // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. 2023. Т. 165, кн. 3. С. 236–245. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.236-245>.

For citation: Kuznetsova E.L., Zhavoronok S.I. A Stefan problem for composite materials with an arbitrary number of moving phase-transition boundaries. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2023, vol. 165, no. 3, pp. 236–245. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.236-245>. (In Russian)

ОРИГИНАЛЬНАЯ СТАТЬЯ

УДК 539.3

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.246-263

ВАРИАЦИОННАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ ТЕРМОМЕХАНИКИ

С. А. Лурье, П. А. Белов, А. В. Волков

*Институт прикладной механики Российской академии наук (ИПРИМ РАН),
г. Москва, 125040, Россия*

Аннотация

Для построения динамических вариационных моделей термомеханики сплошной среды предложено рассматривать 4D-пространственно-временной континуум. Для идентификации физических постоянных в обратимых процессах сформулированы физически обоснованные гипотезы: парности пространственных касательных напряжений, классической зависимости импульса от скорости, потенциальности теплового потока (обобщение закона Максвелла–Каттанео). Предполагается, что обобщенный закон Дюамеля–Неймана имеет классический вид. В представленной модели обобщенные законы Максвелла–Каттанео и Дюамеля–Неймана не вводятся феноменологически, а получены как уравнения совместности при исключении термического потенциала из уравнений закона Гука для температуры, теплового потока и давления. Даны определения каналов диссипации как простейших, линейных по вариациям аргументов, неинтегрируемых вариационных форм. В результате получил развитие вариационный принцип, обобщающий вариационный принцип Л.И. Седова. Он является следствием принципа возможных перемещений и определяется как разность вариации лагранжиана обратимых термомеханических процессов и алгебраической суммы каналов диссипации. Доказано, что для классических термомеханических процессов с разрешающими дифференциальными уравнениями второго порядка возможно существование всего шести каналов диссипации. Два из них определяют диссипацию в распадающейся системе – в уравнениях движения и уравнении баланса тепла. Оставшиеся четыре канала определяют эффекты связанности в связанных задачах диссипативной термомеханики.

Ключевые слова: термоупругость, тепловой баланс, процессы термомеханики, обратимость и диссипативность, обобщенный закон Максвелла–Каттанео, обобщенный закон Дюамеля–Неймана, идентификация модулей термомеханических свойств

Введение

Исследование связанных проблем термомеханики с учетом особенностей процессов механического деформирования и теплопереноса чрезвычайно востребованы в настоящее время в связи с развитием современных технологических процессов и необходимостью прогнозировать поведение материалов в условиях воздействия интенсивных физических полей. Эти проблемы представляются весьма сложными и не решенными в полной мере до настоящего времени. Например, известно, что классическая теория теплопереноса становится недостаточной для описания распространения тепла при низких температурах [1], а также для понимания термоупругих свойств малоразмерных систем [2, 3], для случаев моделирования наноструктурных микроэлектронных компонентов и различных термоэлектрических устройств [4].

Связные проблемы тепломассопереноса требуют привлечения более общих моделей типа Максвелла–Каттанео [5], которые свободны от противоречий моделей теплопереноса диффузионного типа. Эта составляющая общей проблемы моделирования термодинамического процесса деформирования до настоящего времени является объектом тщательных исследований и обобщений. При этом следует иметь в виду, что, как правило, закон теплопроводности Фурье и его обобщения связаны с необратимыми термодинамическими процессами. Отметим, например, работы [6, 7], где было показано, что время релаксации в законе теплопроводности Максвелла–Каттанео может определяться вязкоупругими свойствами сред, и это, конечно, не исключает других причин, приводящих не к диффузионным, а к волновым механизмам передачи тепла. Необходимым является учет связности полей деформирования и тепловых полей в динамических процессах термомеханики в рамках и обратимых, и необратимых процессов. В связи с этим отметим, что весьма эффективной для построения обобщенной динамической термоупругости оказалась идея рассмотрения пространственно-временного континуума (4D-среда), трансверсально-изотропного в отношении временной координаты [8, 9]. Установлено, что законы Максвелла–Каттанео и Дюамеля–Неймана в рамках таких обобщенных моделей не вводятся феноменологически, а могут быть построены как уравнения совместности [10–13]. В работах [10, 14] отмечена и важность учета масштабных эффектов при моделировании термомеханических процессов. Доказано, что масштабные эффекты существенно влияют на процессы теплопереноса, в частности, на переход от диффузионного механизма к волновому.

Наиболее сложной является проблема полноты сформулированных моделей, их согласованности с физическим смыслом и непротиворечивости экспериментальным данным. Эти вопросы возникают при решении проблемы идентификации физических параметров моделей в рамках обратимых и необратимых процессов. С формальной точки зрения построение согласованных физических моделей сводится к формулировке корректных разрешающих уравнений, краевых и начальных условий для процессов, в которых эффекты взаимовлияния механических и тепловых полей могут быть существенными и которые сопровождаются диссипацией. При этом вариационным методам моделирования, вероятно, нет альтернативы. Развитие вариационных моделей 4D-сред показало, что использование вариационного метода Л.И. Седова [15, 16] при построении моделей позволило построить замкнутый вариант связной модели теплопереноса и термоупругости, согласованный термодинамикой необратимых процессов [9–13].

В настоящей работе модель пространственно-временного континуума использована, чтобы развить наиболее полный вариант вариационной модели для связных необратимых динамических процессов теплопереноса и термомеханики деформируемых сред и с наибольшей полнотой учесть связные эффекты в отношении пространственных и временных координат. Предложена процедура идентификации параметров вариационной модели из условий согласования формально построенной модели с известными физическими соотношениями в механике сред и теории теплообмена. Идентификация характеристик диссипативных составляющих моделируемых процессов сведена к формулировке возможных каналов диссипации.

1. Вариационная 4D-постановка связанной задачи для обратимых термомеханических процессов

Будем рассматривать динамическое силовое и тепловое состояние изотропной среды. Деформированное состояние будем определять 3D-вектором перемещений r_i , а тепловое состояние – термическим потенциалом R . Определим 4D-вектор

перемещений R_i следующим разложением:

$$R_i = r_i + icRN_i, \quad r_i = R_a\delta_{ai}^*, \quad R = \frac{R_a N_a}{ic}. \quad (1)$$

Здесь δ_{ij} – 4D-тензор Кронекера ($\delta_{ij}\delta_{ij} = 4$); $\delta_{ij}^* = \delta_{ij} - N_i N_j$ – 3D-тензор Кронекера ($\delta_{ij}^*\delta_{ij}^* = 3$), N_j – орт времени, c – нормирующий множитель размерности скорости, $i = \sqrt{-1}$ – мнимая единица. Индексы пробегают значения от 1 до 4.

Для определения силовой модели используем принцип возможных перемещений, считая, что список аргументов определяется тензором обобщённых 4D-дисторсий $R_{i,j}$ и вектором 4D-перемещений R_i (см. (1))

$$\begin{aligned} \delta A - \int (\sigma_{ij}\delta R_{i,j} + \sigma_i\delta R_i)dV_4 &= 0, \\ \int (\sigma_{ij,j} - \sigma_i + P_i^{V_4})\delta R_i dV_4 - \int (P_i^{F_4} - \sigma_{ij}n_j)\delta R_i dF_4 &= 0. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь $A = \int P_i^{V_4} R_i dV_4 + \int P_i^{F_4} R_i dF_4$ – работа внешних 4D объёмных сил $P_i^{V_4}$:

$$P_i^{V_4} = p_i^V + p^V(ic)^{-1}N_i, \quad p_i^V = P_j^{V_4}\delta_{ji}^*, \quad p^V = (ic)P_j^{V_4}N_j;$$

и внешних 4D поверхностных сил $P_i^{F_4}$:

$$P_i^{F_4} = p_i^F + p^F(ic)^{-1}N_i, \quad p_i^F = P_j^{F_4}\delta_{ji}^*, \quad p^F = (ic)P_j^{F_4}N_j$$

на 4D-перемещениях R_i . Под объёмом V_4 будем понимать односвязное множество пространственно-временных событий, а под гиперповерхностью F_4 – кусочно-гладкую поверхность, ограничивающую выбранный объём.

1.1. Достаточные условия обратимости термомеханических процессов. Достаточные условия обратимости термомеханических процессов определяются формулами Грина

$$\sigma_i = \frac{\partial U^{V_4}}{\partial R_i}, \quad \sigma_{ij} = \frac{\partial U^{V_4}}{\partial R_{i,j}}. \quad (3)$$

Подставив (3) в (2), получим формулировку вариационного принципа Лагранжа для обратимых термомеханических процессов в 4D-среде:

$$\delta L = 0, \quad L = A - \int U^{V_4} dV_4. \quad (4)$$

Принцип Лагранжа (4) позволяет интерпретировать потенциал U^{V_4} как 4D-плотность потенциальной энергии.

1.2. Необходимые условия обратимости термомеханических процессов. Необходимые условия обратимости термомеханических процессов определяются условиями Коши–Римана путем исключения из (3) потенциала U^{V_4} :

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_i}{\partial R_m} - \frac{\partial \sigma_m}{\partial R_i} = 0, \\ \frac{\partial \sigma_i}{\partial R_{m,n}} - \frac{\partial \sigma_{mn}}{\partial R_i} = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial R_m} - \frac{\partial \sigma_m}{\partial R_{i,j}} = 0, \\ \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial R_{m,n}} - \frac{\partial \sigma_{mn}}{\partial R_{i,j}} = 0. \end{cases} \quad (5)$$

Перепишем (5) в виде, удобном для определения нелинейных тензоров модулей обратимых свойств второго E_{im} , третьего E_{imn} , $\bar{E}_{ijm}$ и четвертого рангов E_{ijmn} :

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_i}{\partial R_m} = \frac{\partial \sigma_m}{\partial R_i} = E_{im}, \\ \frac{\partial \sigma_i}{\partial R_{m,n}} = \frac{\partial \sigma_{mn}}{\partial R_i} = E_{imn}, \end{cases} \quad \begin{cases} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial R_m} = \frac{\partial \sigma_m}{\partial R_{i,j}} = \bar{E}_{ijm}, \\ \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial R_{m,n}} = \frac{\partial \sigma_{mn}}{\partial R_{i,j}} = E_{ijmn}. \end{cases} \quad (6)$$

Исключив в (6) производные от силовых факторов, получим свойства симметрии нелинейных тензоров модулей обратимых свойств

$$\begin{cases} E_{im} = E_{mi}, \\ E_{imn} = \bar{E}_{mni}, \end{cases} \quad \begin{cases} \bar{E}_{ijm} = E_{mij}, \\ E_{ijmn} = E_{mnij}. \end{cases} \quad (7)$$

Обратим внимание, что условия (7) приводят к тому, что из двух тензоров третьего (нечетного) ранга E_{imn} , $\bar{E}_{imn}$ независимым остается только один E_{imn} .

В результате установлено, что тензор модулей упругости третьего ранга в общем случае не ограничен никакими условиями симметрии.

Необходимые условия обратимости термомеханических процессов (1)–(5) сводятся в итоге к условиям симметрии тензоров модулей четного ранга

$$E_{im} = E_{mi}, \quad E_{ijmn} = E_{mnij}. \quad (8)$$

С учетом трансверсальной изотропности пространства событий в соответствии с (1) тензорный базис для тензоров модулей обратимых свойств второго ранга состоит из двух тензоров δ_{im}^* и $N_i N_m$, а разложение в этом базисе тензора E_{im} имеет вид

$$E_{im} = E_1 \delta_{im}^* + E_2 (ic)^{-2} N_i N_m. \quad (9)$$

Разложение (9) тождественно удовлетворяет условиям симметрии (8). Тензорный базис для тензоров модулей обратимых свойств третьего ранга состоит из четырех тензоров, являющихся тензорным произведением 3D-тензора Кронекера, орта времени и трех ортов времени, а разложение в этом базисе тензора E_{imn} имеет вид

$$E_{imn} = E_3 (ic) \delta_{im}^* N_n + E_4 (ic)^{-1} \delta_{mn}^* N_i + E_5 (ic)^{-1} \delta_{ni}^* N_m + E_6 (ic)^{-1} N_i N_m N_n. \quad (10)$$

Ещё раз отметим, что единственный тензор модулей обратимых свойств третьего ранга не должен удовлетворять никаким условиям симметрии. Тензорный базис для тензоров модулей обратимых свойств четвертого ранга строится из десяти тензоров, являющихся тензорными произведениями двух 3D-тензоров Кронекера, одного 3D-тензора Кронекера, двух ортов времени и, наконец, тензорного произведения четырёх ортов времени. Разложение в этом базисе тензора E_{ijmn} имеет вид

$$\begin{aligned} E_{ijmn} = & E_7 \delta_{ij}^* \delta_{mn}^* + E_8 \delta_{im}^* \delta_{nj}^* + E_9 \delta_{in}^* \delta_{jm}^* + E_7 \delta_{ij}^* \delta_{mn}^* + E_8 \delta_{im}^* \delta_{nj}^* + E_9 \delta_{in}^* \delta_{jm}^* + \\ & + E_{10} \delta_{ij}^* N_m N_n + E_{11} \delta_{im}^* N_j N_n + E_{12} \delta_{in}^* N_m N_j + E_{13} \delta_{jm}^* N_n N_i + \\ & + E_{14} \delta_{jn}^* N_m N_i + E_{15} \delta_{mn}^* N_i N_j + E_{16} N_i N_j N_m N_n. \end{aligned} \quad (11)$$

Условия симметрии (8) сокращают число модулей в тензоре (11) с десяти до восьми:

$$\begin{cases} E_{10} - E_{15} = 0, \\ E_{12} - E_{13} = 0. \end{cases} \quad (12)$$

Тензор (11) приобретает вид

$$\begin{aligned} E_{ijmn} = & E_7 \delta_{ij}^* \delta_{mn}^* + E_8 \delta_{im}^* \delta_{nj}^* + E_9 \delta_{in}^* \delta_{jm}^* + \\ & + (E_{10} + E_{15})(\delta_{ij}^* N_m N_n + \delta_{mn}^* N_i N_j)/2 + (E_{12} + E_{13})(\delta_{in}^* N_m N_j + \delta_{mj}^* N_i N_n)/2 + \\ & + E_{11} \delta_{im}^* N_j N_n + E_{14} \delta_{jn}^* N_m N_i + E_{16} N_i N_j N_m N_n. \end{aligned} \quad (13)$$

1.3. Достаточные условия диссипативности термомеханических процессов. Структура тензоров модулей упругости диссипативных процессов. Положим, что условия (5) нарушаются и уравнения системы (5) становятся неоднородными:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \sigma_i}{\partial R_m} - \frac{\partial \sigma_m}{\partial R_i} = 2D_{im}, \\ \frac{\partial \sigma_i}{\partial R_{m,n}} - \frac{\partial \sigma_{mn}}{\partial R_i} = 2D_{imn}, \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial R_m} - \frac{\partial \sigma_m}{\partial R_{i,j}} = 2\bar{D}_{ijm}, \\ \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial R_{m,n}} - \frac{\partial \sigma_{mn}}{\partial R_{i,j}} = 2D_{ijmn}. \end{array} \right. \quad (14)$$

Неоднородные условия (14) можно трактовать как достаточные условия диссипативности процессов деформирования.

Установим свойства симметрии для модулей упругости необратимых, диссипативных процессов. Так же, как ранее при анализе (7), из двух тензоров третьего (нечетного) ранга D_{imn} , $\bar{D}_{imn}$ один D_{imn} является независимым. Тензор третьего ранга диссипативных свойств, следовательно, может быть произвольным в отношении симметрии, т. е. не обладает свойствами симметрии относительно перестановок первого индекса и оставшейся пары индексов.

Отметим, что доказанное свойство отсутствия какой-либо симметрии из-за условий интегрируемости/неинтегрируемости является справедливым для модулей и обратимых, и необратимых процессов. По-видимому, это утверждение доказано впервые для обобщенных моделей сред [14].

Нетрудно видеть, что из условий (14) следуют свойства антисимметрии для тензоров модулей диссипативных свойств четного ранга:

$$D_{mi} = -D_{im}, \quad D_{mnij} = -D_{ijnm}. \quad (15)$$

Воспользуемся базисами тензоров второго, третьего и четвертого рангов, чтобы последовательно исследовать структуру тензоров диссипативных свойств.

Так как в разложении тензора второго ранга по базисным тензорам $D_{im} = D_1 \delta_{im}^* + D_2 (ic)^{-2} N_i N_m$ оба базисных тензора второго ранга δ_{im}^* и $N_i N_m$ не удовлетворяют свойству антисимметрии, то, следуя (15), можно утверждать, что не существует в 4D тензора диссипативных свойств второго ранга D . В результате следует принять $D_1 = D_2 = 0$.

Структура тензора диссипативных свойств третьего ранга не ограничена условиями антисимметрии, потому можно по аналогии с (10) записать

$$D_{imn} = D_3 (ic) \delta_{im}^* N_n + D_4 (ic)^{-1} \delta_{mn}^* N_i + D_5 (ic)^{-1} \delta_{ni}^* N_m + D_6 (ic)^{-1} N_i N_m N_n. \quad (16)$$

Следовательно, тензоры диссипативных свойств третьего ранга определяются четырьмя модулями D_3, D_4, D_5, D_6 .

Тензор модулей диссипативных свойств четвертого ранга в общем виде, как и в (11), имеет структуру

$$\begin{aligned} D_{ijmn} = & E_7 \delta_{ij}^* \delta_{mn}^* + D_8 \delta_{im}^* \delta_{nj}^* + D_9 \delta_{in}^* \delta_{jm}^* + \\ & + D_{10} \delta_{ij}^* N_m N_n + D_{11} \delta_{im}^* N_j N_n + D_{12} \delta_{in}^* N_m N_j + D_{13} \delta_{jm}^* N_n N_i + \\ & + D_{14} \delta_{jn}^* N_m N_i + D_{15} \delta_{mn}^* N_i N_j + D_{16} N_i N_j N_m N_n. \end{aligned} \quad (17)$$

Условия антисимметрии по первой и второй парам индексов ограничивают число модулей, поэтому на основании (15) следует потребовать

$$D_7 = D_8 = D_9 = (D_{10} + D_{15})/2 = (D_{12} + D_{13})/2 = D_{11} = D_{14} = D_{16} = 0. \quad (18)$$

Соответственно, следуя (17) и (18), получим, что тензор четвертого ранга D_{ijmn} определяется двумя модулями G_1 и G_2 и имеет вид

$$D_{ijmn} = G_1(\delta_{ij}^* N_m N_n - \delta_{mn}^* N_i N_j)/2 + G_2(\delta_{in}^* N_m N_j - \delta_{jm}^* N_i N_n)/2. \quad (19)$$

Таким образом, предлагаемая физическая модель наделяет 4D-среду в общем случае двадцатью физическими параметрами. Четырнадцать из них ($2+4+8=14$) определяют свойства среды при обратимых процессах, а шесть ($0+4+2=6$) – свойства среды при диссипативных процессах. В общем случае для физически нелинейных процессов эти физические параметры являются функциями всех кинематических переменных.

1.4. Определяющие соотношения. Рассмотрим соотношения (6). Их можно трактовать как общее решение однородной алгебраической системы (5) относительно производных от силовых факторов. Чтобы найти решение неоднородной алгебраической системы (14), достаточно построить частное решение этой неоднородной системы уравнений. Нетрудно проверить непосредственной подстановкой, что общее решение системы (14) будет иметь вид

$$\begin{cases} \frac{\partial \sigma_i}{\partial R_m} = E_{im} + D_{im}, & \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial R_m} = E_{mij} - D_{mij}, \\ \frac{\partial \sigma_i}{\partial R_{m,n}} = E_{imn} + D_{imn}, & \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial R_{m,n}} = E_{ijmn} + D_{ijmn}. \end{cases} \quad (20)$$

Представление (20) является дифференциальной формой определяющих уравнений для физически нелинейных сред, справедливых и для обратимых, и для необратимых процессов. Равенства (20) можно представить в виде, удобном для интегрирования в квадратурах,

$$d\sigma_i = \frac{\partial \sigma_i}{\partial R_m} dR_m + \frac{\partial \sigma_i}{\partial R_{m,n}} dR_{m,n} = (E_{im} + D_{im})dR_m + (E_{imn} + D_{imn})dR_{m,n}, \quad (21)$$

$$d\sigma_{ij} = \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial R_m} dR_m + \frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial R_{m,n}} dR_{m,n} = (E_{mij} - D_{mij})dR_m + (E_{ijmn} + D_{ijmn})dR_{m,n}.$$

При гипотезах линейности физических уравнений и ненапряженного начального состояния из (21) вытекают линейные уравнения закона Гука

$$\begin{aligned} \sigma_i &= (E_{im} + D_{im})R_m + (E_{imn} + D_{imn})R_{m,n}, \\ \sigma_{ij} &= (E_{mij} - D_{mij})R_m + (E_{ijmn} + D_{ijmn})R_{m,n}. \end{aligned} \quad (22)$$

Здесь модули упругости E_{im} , E_{mij} и E_{ijmn} соответствуют обратимой части процессов термомеханического деформирования (10), (11) и (13), а модули $G_1, G_2, D_3, D_4, D_5, D_6$ – необратимой части этих процессов (см. (15)–(19)). Запишем определяющие соотношения (22) в более подробном виде, учитывая структуру тензоров модулей упругости (9), (10), (13) и (16), (19). Уравнения закона Гука для обобщенных внутренних сил σ_i в 4D принимают вид

$$\begin{aligned} \sigma_i &= (E_3 + D_3)\dot{r}_i + E_1 r_i + (E_5 + D_5)R_{,i} + \\ &+ [(E_4 + D_4)r_{m,m} + E_2 R + (E_6 + D_6)\dot{R}](ic)^{-1} N_i. \end{aligned} \quad (23)$$

Уравнения закона Гука для напряжений σ_{ij} в 4D запишем в следующей форме

$$\begin{aligned}\sigma_{ij} = & (E_3 - D_3)(ic)N_j r_i + (E_4 - D_4)\delta_{ij}^* R + \\ & + (E_5 - D_5)(ic)^{-1}N_i r_j + (E_6 - D_6)N_i N_j R + E_7 \delta_{ij}^* r_{m,m} + E_8 r_{i,j} + E_9 r_{j,i} + \\ & + (E_{10} + E_{15} + G_1)\delta_{ij}^* \dot{R}/2 + (E_{10} + E_{15} - G_1)N_i N_j r_{m,m}/2 + \\ & + (E_{12} + E_{13} + G_2)(ic)N_j R_{,i}/2 + (E_{12} + E_{13} - G_2)(ic)^{-1}N_i \dot{r}_j/2 + \\ & + E_{11}(ic)^{-1}N_j \dot{r}_i + E_{14}(ic)N_i R_{,j} + E_{16}N_i N_j \dot{R}.\end{aligned}\quad (24)$$

Исследуем физические свойства тензора напряжений σ_{ij} в (24), установив соответствие компонент этого тензора с силовыми факторами, известными в механике твёрдого тела. Используя определение силовых факторов различной тензорной размерности в 3D как физических величин, совершающих работу на соответствующих кинематических переменных, дадим определения 3D-тензора пространственных напряжений σ_{ab}^* , 3D-вектора импульса p_a , 3D-вектора теплового потока q_a и 3D-скаляров давления p и температуры T :

$$\begin{aligned}\sigma_{ab}^* = & \sigma_{ij}\delta_{ia}^*\delta_{jb}^* = E_7\delta_{ab}^*r_{m,m} + E_8r_{a,b} + E_9r_{b,a} + \\ & + (E_{10} + E_{15} + D_1)\delta_{ab}^*\dot{R}/2 + (E_4 - D_4)\delta_{ab}^*R; \\ p = & \sigma_{ij}\delta_{ij}^*/3 = \\ = & (E_7 + E_8/3 + E_9/3)r_{m,m} + (E_{10} + E_{15} + G_1)\dot{R}/2 + (E_4 - D_4)R; \\ p_a = & -\sigma_{ij}\delta_{ia}^*N_j/(ic) = -E_{11}(ic)^{-2}\dot{r}_a - (E_3 - D_3)r_a - (E_{12} + E_{13} + G_2)R_{,a}/2; \\ q_a = & \sigma_{ij}N_i\delta_{ja}^*(ic) = (E_{12} + E_{13} - G_2)\dot{r}_a/2 + (E_5 - D_5)r_a + E_{14}(ic)^2R_{,a}; \\ T = & \sigma_{ij}N_iN_j = (E_{10} + E_{15} - G_1)r_{m,m}/2 + E_{16}\dot{R} + (E_6 - D_6)R.\end{aligned}\quad (25)$$

1.5. Идентификация параметров модели. Будем полагать, что идентификацию параметров модели следует осуществлять отдельно для обратимых и необратимых процессов, так как отмеченные процессы дополняют друг друга. Рассматривая обратимые процессы, далее следует принять равными нулю все диссипативные модули $D_\alpha = 0$, $\alpha = 1 : 6$ или $G_1 = G_2 = 0$, $D_3 = D_4 = D_5 = D_6 = 0$.

Идентификацию модулей обратимых свойств начнем с закона Гука для 3D-тензора-девиатора пространственных напряжений. Из уравнений (25) имеем

$$\tau_{ab}^* = \sigma_{ab}^*/2 + \sigma_{ba}^*/2 - \delta_{ab}^*\sigma_{kk}^*/3 = (E_8 + E_9)(r_{a,b}/2 + r_{b,a}/2 - r_{k,k}\delta_{ab}^*/3). \quad (26)$$

Уравнения закона Гука для 3D-тензора-девиатора пространственных напряжений (26) полностью совпадают с классическими. Единственная комбинация модулей легко отождествляется с удвоенным модулем сдвига:

$$E_8 + E_9 = 2\mu. \quad (27)$$

Уравнение закона Гука для антисимметричной части 3D-тензора касательных напряжений (см. (25)) имеет вид

$$(\sigma_{ab}^* - \sigma_{ba}^*)/2 = (E_8 - E_9)(r_{a,b} - r_{b,a})/2.$$

В соответствии с классической «гипотезой парности касательных напряжений» третий коэффициент Ламе должен быть равен нулю:

$$(E_8 - E_9) = 2\chi = 0. \quad (28)$$

В совокупности с определением первых двух коэффициентов Ламе гипотеза парности дает (см. (26)–(28))

$$E_7 = \lambda, \quad E_8 = \mu, \quad E_9 = \mu. \quad (29)$$

Таким образом, определены три исходных модуля (29) через два коэффициента Ламе λ, μ и третий, неклассический коэффициент Ламе χ , который в силу гипотезы парности следует считать равным нулю. Уравнение закона Гука для температуры содержит три исходных модуля обратимых свойств (25)

$$T = (E_{10} + E_{15})r_{m,m}/2 + E_6 R + E_{16} \dot{R}. \quad (30)$$

Введем для двух линейных комбинаций исходных модулей следующие обозначения:

$$(E_{10} + E_{15})/2 = -\frac{(K - K_T)}{K_T \alpha}, \quad E_{16} = \tau E_6. \quad (31)$$

Уравнение закона Гука для температуры (30) с учетом (31) приобретает вид

$$T = -\frac{(K - K_T)}{K_T \alpha} r_{m,m} + E_6 (R + \tau \dot{R}). \quad (32)$$

Из уравнения закона Гука для температуры (32) следует определение оператора температуры $t(\dots)$:

$$t(R) = E_6 (R + \tau \dot{R}) = T + \frac{(K - K_T)}{K_T \alpha} r_{m,m}. \quad (33)$$

Поддействуем на уравнение закона Гука (25) для теплового потока оператором температуры (33) и найдем

$$\begin{aligned} q_a + \tau \dot{q}_a = & -k_v \left[T + \frac{K - K_T}{K_T \alpha} r_{m,m} \right]_{,a} + \\ & + \frac{E_{12} + E_{13}}{2} \tau \ddot{r}_a + \left[\frac{E_{12} + E_{13}}{2} + E_5 \tau \right] \dot{r}_a + E_5 r_a. \end{aligned} \quad (34)$$

Полученное уравнение является обобщением закона теплопроводности Максвелла–Каттанео. Оно построено как уравнение совместности путем исключения термического потенциала R из уравнений закона Гука для температуры и теплового потока. Это уравнение полностью совпадает с классическим законом Максвелла–Каттанео при справедливости «ослабленной гипотезы Фурье» – тепловой поток должен быть потенциальным векторным полем и не содержать вектор перемещений и его производные по времени, иначе поле перемещений будет иметь вихревую составляющую, что противоречит экспериментальным данным о потенциальности теплового потока. Полученное обобщение закона теплопроводности Максвелла–Каттанео (34) содержит пять линейных комбинаций исходных модулей. Три модуля, в соответствии с классическими представлениями, выражаются через время τ релаксации теплового потока, коэффициент теплопроводности k_v при постоянном объеме и комбинацию известных термомеханических параметров $(K - K_T)/(K_T \alpha)$, где K , K_T – соответственно адиабатический и изотермический модули объемной деформации, α – коэффициент температурного расширения.

Ещё две комбинации исходных модулей можно принять равными нулю на основании «ослабленной гипотезы Фурье»:

$$\frac{E_{12} + E_{13}}{2} = 0, \quad E_5 = 0. \quad (35)$$

Поддействуем на уравнение закона Гука для давления (25) оператором температуры и найдем

$$p + \tau \dot{p} = \left[K + \frac{E_4}{E_6} \frac{K - K_T}{K_T \alpha} \right] r_{m,m} + \frac{E_4}{E_6} T + \left[\frac{(E_{10} + E_{15})}{2E_6} \frac{(K - K_T)}{K_T \alpha} + K \tau \right] \dot{r}_{m,m}.$$

Обозначим

$$E_4 = -K_T \alpha E_6. \quad (36)$$

В результате с учетом (35) и (36) получим

$$\begin{aligned} p + \tau \dot{p} = & \\ = K_T (r_{m,m} - \alpha T) + & \left[\frac{(E_{10} + E_{15})}{2E_6} \frac{(K - K_T)}{K_T \alpha} + K \tau \right] \dot{r}_{m,m} + \frac{(E_{10} + E_{15})}{2E_6} \dot{T}. \end{aligned} \quad (37)$$

Полученное обобщение закона Дюамеля–Неймана является уравнением совместности – результатом исключения из уравнений закона Гука (25) для температуры и давления термического потенциала. Оно полностью совпадает с классическим законом Дюамеля–Неймана в предельном случае затухания всех термомеханических переходных процессов, когда слагаемыми, содержащими производные по времени в (37), можно пренебречь по сравнению со слагаемыми, содержащими сами функции.

Наконец, рассмотрим уравнение закона Гука (25) для импульса

$$p_a = -E_{11}(ic)^{-2} \dot{r}_a - E_3 r_a - \frac{E_{12} + E_{13}}{2} R_{,a}. \quad (38)$$

Оно не должно противоречить классическому определению импульса. Поэтому из трех модулей, входящих в выражение для импульса, один будет определяться через плотность среды ρ , а оставшиеся две комбинации следует положить равными нулю:

$$E_{11} = \rho c^2, \quad E_3 = 0, \quad \frac{E_{12} + E_{13}}{2} = 0. \quad (39)$$

В случае условий (39) уравнение закона Гука для импульса принимает классический вид $p_a = \rho \dot{r}_a$.

Из принципа возможных перемещений (2) с учетом (23), (25) и условий (29), (31), (35) следуют 4D-уравнения равновесия:

$$\begin{aligned} \sigma_{ij,j} - \sigma_i + P_i^{V_4} = & \\ = (2\mu + \lambda) r_{m,mi} + \mu (\Delta r_i - r_{m,mi}) - \rho \ddot{r}_i - K_T \alpha E_6 R_{,i} - \frac{(K - K_T)}{K_T \alpha} \dot{R}_{,i} + & \\ + \left[-k_V E_6 \Delta R + \tau E_6 \ddot{R} - E_2 R - K_T \alpha E_6 r_{m,m} - \frac{(K - K_T)}{K_T \alpha} \dot{r}_{m,m} \right] (ic)^{-1} N_i + & \\ + P_i^{V_4} = 0. & \end{aligned} \quad (40)$$

Положим, что в уравнении (40) использована «гипотеза отсутствия винклеровских оснований». В результате получим (см. (40) и (21))

$$E_1 = 0, \quad E_2 = 0. \quad (41)$$

Разделим (40) на пространственную и временную части и учтем (41). Пространственная часть полученных равенств даст 3D-уравнения движения с учетом теплообмена

$$(2\mu + \lambda) r_{m,mk} + \mu (\Delta r_k - r_{m,mk}) - \rho \ddot{r}_k - K_T \alpha E_6 R_{,k} - \frac{(K - K_T)}{K_T \alpha} \dot{R}_{,k} + P_i^{V_4} \delta_{ik}^* = 0. \quad (42)$$

Уравнения движения в смешанной форме (в 3D-перемещениях и температуре) получим, подействовав на уравнения движения (42) оператором температуры (33):

$$\begin{aligned} & \left[(2\mu + \lambda_T)r_{m,mk} + \mu(\Delta r_k - r_{m,mk}) - \rho\ddot{r}_k + P_i^{V_4}\delta_{ik}^* - K_T\alpha T_{,k} \right] + \\ & + \tau \left[(2\mu + \lambda)\dot{r}_{m,mk} + \mu(\Delta\dot{r}_k - \dot{r}_{m,mk}) - \rho\ddot{\dot{r}}_k + \dot{P}_i^{V_4}\delta_{ik}^* \right] - \\ & - \frac{(K - K_T)}{K_T\alpha E_6} \left[\dot{T} + \frac{(K - K_T)}{K_T\alpha} \dot{r}_{m,m} \right]_{,k} = 0. \end{aligned} \quad (43)$$

Оставшуюся неопределенной константу формально выразим через другую константу l :

$$E_6 = \frac{k_V (2\mu + \lambda)}{l^2 (K_T\alpha)^2}. \quad (44)$$

В результате с учетом (44) уравнения движения (43) примут вид

$$\begin{aligned} & \left[(2\mu + \lambda_T)r_{m,mk} + \mu(\Delta r_k - r_{m,mk}) - \rho\ddot{r}_k + P_i^{V_4}\delta_{ik}^* - K_T\alpha T_{,k} \right] + \\ & + \tau \left[(2\mu + \lambda)\dot{r}_{m,mk} + \mu(\Delta\dot{r}_k - \dot{r}_{m,mk}) - \rho\ddot{\dot{r}}_k + \dot{P}_i^{V_4}\delta_{ik}^* \right] - \\ & - \frac{l^2}{k_V} \frac{K - K_T}{2\mu + \lambda} \left[K_T\alpha\dot{T} + (K - K_T)\dot{r}_{m,m} \right]_{,k} = 0. \end{aligned} \quad (45)$$

Временная часть уравнения (45) даст скалярное уравнение нестационарного баланса тепла

$$\begin{aligned} & -k_V\Delta R + \tau\ddot{R} - (K_T\alpha)r_{m,m} - \frac{l^2}{k_V} \frac{(K_T\alpha)(K - K_T)}{2\mu + \lambda} \dot{r}_{m,m} + \\ & + \frac{l^2}{k_V} \frac{(K_T\alpha)^2}{2\mu + \lambda} P_i^{V_4}(ic)N_i = 0. \end{aligned} \quad (46)$$

Уравнение нестационарного баланса тепла в смешанной форме (46) при действии на него оператором температуры (33) приобретет вид

$$\begin{aligned} & -k_V\Delta T + \tau\ddot{T} - k_V \frac{(K - K_T)}{K_T\alpha} \Delta r_{m,m} - \left[\frac{\tau k_V (2\mu + \lambda)}{l^2} \frac{(K - K_T)}{K_T\alpha} + \frac{(K - K_T)}{K_T\alpha} \right] \dot{r}_{m,m} - \\ & - \frac{k_V}{l^2} \frac{2\mu + \lambda}{K_T\alpha} r_{m,m} + (P_i^{V_4} + \tau\dot{P}_i^{V_4})(ic)N_i = 0. \end{aligned} \quad (47)$$

Таким образом, дана идентификация всем модулям обратимых свойств в 4D-термомеханике обратимых процессов. Из четырнадцати исходных модулей семь выражены через известные физические константы материала $\mu, \lambda, \lambda_T, \alpha, \rho, k_V, \tau$, шесть модулей $E_1, E_2, E_3, E_5, (E_8 - E_9)/2, (E_{12} + E_{13})/2$ приняты равными нулю в силу сформулированных физически обоснованных гипотез и один в силу определения (44) выражен через неизвестную физическую константу l , которая будет идентифицирована ниже:

$$\begin{cases} E_1 = E_2 = E_3 = 0, & E_4 = -K_T\alpha E_6, & E_5 = 0, \\ E_6 = \frac{1}{l^2} \frac{(2\mu + \lambda)k_V}{(K_T\alpha)^2}, & E_7 = \lambda, & E_8 = E_9 = \mu, \\ \frac{E_{10} + E_{15}}{2} = -\frac{(K - K_T)}{K_T\alpha}, & E_{11} = \rho c^2, \\ \frac{E_{12} + E_{13}}{2} = 0, & E_{14} = k_V E_6 c^{-2}, & E_{16} = \tau E_6. \end{cases} \quad (48)$$

С учётом равенства (48) уравнения закона Гука примут вид

$$\begin{aligned}
 \sigma_{ab}^* &= 2\mu(r_{a,b}/2 + r_{b,a}/2 - r_{m,m}\delta_{ab}^*/3 + \\
 &+ \left[(2\mu/3 + \lambda)r_{m,m} - \frac{K - K_T}{K_T\alpha}\dot{R} - \frac{k_V}{l^2} \frac{2\mu + \lambda}{K_T\alpha}R \right] \delta_{ab}^*, \\
 p &= (2\mu/3 + \lambda)r_{m,m} - \frac{K - K_T}{K_T\alpha}\dot{R} - \frac{k_V}{l^2} \frac{2\mu + \lambda}{K_T\alpha}R, \\
 p_a &= \rho\dot{r}_a, \\
 q_a &= -k_V - \frac{k_V}{l^2} \frac{2\mu + \lambda}{(K_T\alpha)^2}R_{,a}, \\
 T &= -\frac{K - K_T}{K_T\alpha}r_{m,m} + \frac{k_V}{l^2} \frac{2\mu + \lambda}{(K_T\alpha)^2}(R + \tau\dot{R}).
 \end{aligned} \tag{49}$$

2. Вариационная постановка связанной задачи для диссипативных термомеханических процессов

Сформулируем обобщенный вариант вариационного принципа для диссипативных процессов, согласно которому вариационное уравнение принципа возможных перемещений представляется в виде разности вариации лагранжиана обратимой части и суммы каналов диссипации различных рангов (третьего и четвертого рангов (см. раздел 1.2)). Учитывая (2), получим

$$\begin{aligned}
 \delta L - \overline{\delta U} &= 0, \\
 L &= A - \frac{1}{2} \int (E_{im}R_mR_i + 2E_{mij}R_mR_{i,j} + E_{ijmn}R_{m,n}R_{i,j})dV_4 \\
 \overline{\delta U} &= \frac{1}{2} \int [D_{im}(R_m\delta R_i - R_i\delta R_m) + 2D_{imn}(R_{m,n}\delta R_i - R_i\delta R_{m,n}) + \\
 &+ D_{ijmn}(R_{m,n}\delta R_{i,j} - R_{i,j}\delta R_{m,n})]dV_4.
 \end{aligned} \tag{50}$$

Суммарный дифференциальный порядок каждого из слагаемых лагранжиана не должен превышать двух (для рассматриваемой модели) так же, как и суммарный дифференциальный порядок каждого из слагаемых в каналах диссипации. При этом каналы диссипации могут быть классифицированы по рангу тензоров диссипативных модулей. Для «классических» моделей, рассматриваемых в работе, каналы диссипации ограничены каналами третьего и четвертого рангов. Для градиентных моделей связанных постановок алгоритм построения вариационной модели остаётся прежним, но суммарный дифференциальный порядок каждого из слагаемых лагранжиана не должен превышать четырех, причем каналы диссипации дополнительно могут содержать каналы диссипации пятого и шестого рангов, и суммарный дифференциальный порядок каждого из слагаемых в любом канале диссипации не должен превышать четырех.

Каналы диссипации, построенные на аргументах соответствующих билинейных слагаемых плотности энергии, с учетом уравнений закона Гука и структуры тензоров модулей диссипативных свойств, в общем случае имеют вид

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{2} \int 2D_{imn}(R_{m,n}\delta R_i - R_i\delta R_{m,n}) + D_{ijmn}(R_{m,n}\delta R_{i,j} - R_{i,j}\delta R_{m,n})dV_4 = \\
 = \overline{\delta U_1} + \overline{\delta U_2} + \overline{\delta U_3} + \overline{\delta U_4} + \overline{\delta U_5} + \overline{\delta U_6},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\overline{\delta U_1} &= \int G_1(R\delta r_{i,i} - r_{i,i}\delta R)dV_4, & \overline{\delta U_2} &= \int G_2(R_{,i}\delta \dot{r}_i - \dot{r}_i\delta R_{,i})dV_4, \\
\overline{\delta U_3} &= \int D_3(\dot{r}_i\delta r_i - r_i\delta \dot{r}_i)dV_4, & \overline{\delta U_4} &= \int D_4(r_{m,m}\delta \dot{R} - \dot{R}\delta r_{m,m})dV_4, \\
\overline{\delta U_5} &= \int D_5(R_{,i}\delta r_i - r_i\delta R_{,i})dV_4, & \overline{\delta U_6} &= \int D_6(\dot{R}\delta R - R\delta \dot{R})dV_4.
\end{aligned} \quad (51)$$

Отметим, что каналы диссипации третьего ранга в (51) играют важную роль при формулировке диссипативных моделей, так как содержат не только каналы диссипации в связанных термомеханических процессах. Действительно, канал диссипации $\overline{\delta U_3}$ определяет соответствующую гидродинамику Дарси безотносительно к связности с теплообменом, а канал диссипации $\overline{\delta U_6}$ определяет классическое уравнение теплообмена и закон теплопроводности Фурье [17].

3. О постановке начально-краевых условий

Рассмотрим множество событий, определяющих состояние термоупругого тела в пространстве–времени. В некоторый момент времени оно занимает некоторый заданный 3D-объём, ограниченный замкнутой 2D-поверхностью. С точки зрения 4D-пространства, такая ситуация по аналогии заменяется гиперплоскостью с нормалью, направленной параллельно орту времени, на которой определен замкнутый 2D-контур, соответствующий замкнутой поверхности в 3D. События, лежащие на гиперплоскости внутри замкнутого контура, относятся к событиям, происходящим внутри и на поверхности 3D-объёма. В разные моменты времени замкнутая поверхность и объём термоупругого тела мало отличаются друг от друга. Иначе, пространство событий, определяющее некоторый термомеханический процесс, является гиперцилиндром с образующей, параллельной орту времени, и направляющей, совпадающей с замкнутой 3D-поверхностью термоупругого тела (замкнутым 2D-контуром в 4D). По определению орт нормали к гиперцилиндрической поверхности n_j ортогонален орту времени N_j и совпадает с ортом нормали к поверхности термоупругого тела. На основании введенных понятий и определений геометрия пространства событий ограничивается суммой трёх гиперповерхностей: гиперцилиндром и двумя «временными» плоскими донышками. Вариационный принцип в 4D для связанной модели термомеханических процессов запишем в виде (2)

$$\int_{V_4} (\sigma_{ij,j} - \sigma_i + P_i^{V_4}) dV_4 + \int_{F_4} (P_i^{F_4} - \sigma_{ij}n_j^4) \delta R_i dF_4 = 0, \quad (52)$$

где n_j^4 – орт 4D-нормали к замкнутой гиперповерхности, ограничивающей пространство событий. Напомним, что на донышках $n_j^4 = \mp N_j$, а на гиперцилиндрической поверхности $n_j^4 = n_j$, $\mathbf{n} = n_j$, $\mathbf{n} \perp \mathbf{N}$.

В каждой неособенной точке гиперповерхности существуют четыре пары альтернативных граничных условий. Уточним физический смысл этих условий. Граничные условия на гиперцилиндрической поверхности при $n_j^4 = n_j$ можно переписать, воспользовавшись разложением вектора 4D-перемещений на пространственную и временную части (52):

$$\begin{aligned}
& \int_{n_j^4 n_j = 1} (P_i^{F_4} - \sigma_{ij}n_j^4) \delta R_i dF_4 - \int_{n_j^4 n_j = 1} [P_i^{F_4} - (\sigma_{ij}\delta_{ia}^* \delta_{jb})n_b] \delta r_a dF_4 + \\
& + \int_{n_j^4 n_j = 1} [P_i^{F_4} N_i - (\sigma_{ij}N_i^* \delta_{jb})n_b] (ic) \delta R dF_4 = 0.
\end{aligned} \quad (53)$$

В равенстве (53) первые три альтернативные пары граничных условий совпадают с классическими граничными условиями классической теории упругости: или задана компонента 3D-перемещений r_a , или в соответствии с (25) задана компонента результирующей внешних и внутренних сил $\int_{n_j^4 n_j=1} (P_a^{F_4} - \sigma_{ab}^* n_b) \delta r_a dF_4 = 0$.

Четвертая альтернативная пара граничных условий позволяет записать граничные условия для уравнения баланса тепла в связанной постановке. В соответствии с последним слагаемым в (53) граничное условие задает термический потенциал R или тепловой поток q_b , $\int_{n_j^4 n_j=1} (P_i^{F_4} N_i - q_b n_b) \delta R dF_4 = 0$.

На временных донышках (при $n_j^4 N_j = \mp 1$) так же, как и на гиперцилиндрической поверхности, в каждой точке заданы четыре пары альтернативных граничных условий

$$\begin{aligned} \int_{n_j^4 n_j=\mp 1} (P_i^{F_4} - \sigma_{ij} N_j) \delta R_i dF_4 &= \int_{n_j^4 n_j=\mp 1} [P_a^{F_4} - (\sigma_{ij} \delta_{ia}^* N_j)] \delta r_a dF_4 \mp \\ \mp \int_{n_j^4 n_j=\mp 1} [P_i^{F_4} N_i - (\sigma_{ij} N_i N_j)] (ic) \delta R dF_4 &= 0. \end{aligned} \quad (54)$$

Первые три альтернативные пары граничных условий в (54)

$$\int_{n_j^4=N_j} (P_a^{F_4} - p_a) \delta r_a dF_4 = 0$$

совпадают с классическими условиями теории упругости в начальный момент времени при $n_j^4 = -N_j$ и в конечный момент времени $n_j^4 = N_j$ процесса (заданы или компонента 3D-импульса $p_a = -\sigma_{ij} \delta_{ia}^* N_j / ic$ (см. (25)), или компонента 3D-вектора перемещений r_a). Четвертая пара альтернативных граничных условий определяется последним слагаемым в равенстве (54)

$$\int_{n_j^4=N_j} (P_i^{F_4} n_i - T) \delta R dF_4 = 0.$$

В этом случае или задано начальное распределение поля температуры в 3D-объеме термоупругого тела T , или задан термический потенциал R . Таким образом, дан анализ спектра краевых задач для связанных задач обратимой термомеханики.

4. Математическая постановка связанной термомеханики для бесконечного слоя

Пусть 3D-вектор перемещений имеет единственную компоненту, определяющую продольные перемещения бесконечного слоя $r_i = r(x, t) X_i$. Положим, что термический потенциал также является функцией двух координат: $R = R(x, t)$. Уравнение движения (45) и уравнение баланса тепла (47) приобретут в этом случае вид

$$(2\mu + \lambda) r^{II} - \rho \ddot{r} - K_T \alpha E_6 R^I - \frac{(K - K_T)}{K_T \alpha} \dot{R}^I = 0, \quad (55)$$

$$-K_T \alpha r^I - \frac{(K - K_T)}{K_T \alpha E_6} \dot{r}^I - k_V R^{II} + \tau \ddot{R} = 0. \quad (56)$$

Введем общий потенциал φ для функций r, R так, чтобы уравнение баланса тепла (56) удовлетворялось тождественно. Тогда разрешающее уравнение на общий потенциал примет вид (см. (55))

$$\begin{aligned} \varphi^{IV} + \left[\frac{\rho}{(2\mu + \lambda)} + \frac{\tau}{k_V} - \frac{(K - K_T)^2}{(2\mu + \lambda)k_V(K_T\alpha)^2 E_6} \right] \ddot{\varphi}^{II} - \frac{\rho}{(2\mu + \lambda)} \frac{\tau}{k_V} \ddot{\varphi} - \\ - \frac{(K_T\alpha)^2 E_6}{(2\mu + \lambda)k_V} \varphi^{II} - 2 \frac{(K - K_T)}{(2\mu + \lambda)k_V} \dot{\varphi}^{II} = 0, \end{aligned} \quad (57)$$

где

$$r = -\frac{k_V}{K_T\alpha} \varphi^{II} + \frac{\tau}{K_T\alpha} \ddot{\varphi}, R = \varphi^I + \frac{(K - K_T)}{(K_T\alpha)^2 E_6} \dot{\varphi}^I.$$

Будем искать решение (57) в виде суперпозиции «плоских волн»:

$$\varphi = e^{kx + i\omega t}. \quad (58)$$

Подставив (58) в (57), получим закон дисперсии для термомеханических волн

$$\begin{aligned} k^4 + \left\{ - \left[\frac{\rho}{(2\mu + \lambda)} + \frac{\tau}{k_V} - \frac{(K - K_T)^2}{(2\mu + \lambda)k_V(K_T\alpha)^2 E_6} \right] \omega^2 - \right. \\ \left. - 2i \frac{K - K_T}{(2\mu + \lambda)k_V} \omega - \frac{(K_T\alpha)^2 E_6}{(2\mu + \lambda)k_V} \right\} k^2 - \frac{\rho}{(2\mu + \lambda)k_V} \frac{\tau}{k_V} \omega^4 = 0. \end{aligned} \quad (59)$$

Из закона дисперсии (59) следует, что для каждого действительного значения круговой частоты при $K = K_T$ будут иметь место две пары комплексно-сопряженных корней для волновых чисел. Наличие у волновых чисел действительной части говорит о том, что «пространственные волны» могут иметь экспоненциальное затухание/возрастание по пространственным координатам. Решение с экспоненциальным затуханием по пространственным координатам можно интерпретировать как пространственно-локализованные термомеханические поля-псевдочастицы. Механическим полям соответствуют фононы, а температурные поля по аналогии можно назвать термонами. Общий случай $K \neq K_T$ соответствует учету диссипативных механических эффектов, может существенно изменять вид решений – ветвей дисперсионного уравнения, и придавать материалам свойства акустических материалов с отрицательным индексом [18].

Заключение

В статье использован 4D-подход к построению динамических моделей термомеханики сплошной среды. Предложена процедура идентификации физических параметров общей модели. Для обратимой части связанных термомеханических процессов физические модули предложенной модели выражены через известные термомеханические параметры $\mu, \lambda, \lambda_T, \alpha, \rho, k_V, \tau$ – модули упругости, коэффициент температурного расширения, плотность, коэффициент теплопроводности и коэффициент запаздывания теплового потока соответственно. Другая часть определяется из условий согласованности общей модели обратимых процессов с правдоподобными физическими гипотезами: парности пространственных касательных напряжений, классической формы связи импульса со скоростью, потенциальности теплового потока, обобщение закона Дюамеля–Неймана. Развита вариационная постановка, обобщающий вариационный принцип Л.И. Седова, который представляет уравнение возможной работы всех внешних и внутренних силовых факторов как разность вариации лагранжиана обратимых термомеханических процессов и алгебраической

суммы каналов диссипации – линейных по вариациям аргументов, неинтегрируемых вариационных форм. Модули упругости идентифицированы по спектру диссипативных каналов теории. Доказано, что для рассматриваемой общей модели неградиентного типа возможно существование всего шести каналов диссипации. При этом два из них определяют диссипацию собственно термомеханических процессов, а оставшиеся четыре канала – эффекты связанности в связанных задачах диссипативной термомеханики.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 23-11-00275), выданного Институтом прикладной механики РАН.

Литература

1. *Joseph D.D., Preziosi L.* Heat waves // *Rev. Mod. Phys.* 1989. V. 61, No 1. P. 41–73. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.61.41>.
2. *Lepri S., Livi R., Politi A.* Thermal conduction in classical low-dimensional lattices // *Phys. Rep.* 2003. V. 377, No 1. P. 1–80. [https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(02\)00558-6](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(02)00558-6).
3. *Dhar A.* Heat transport in low-dimensional systems // *Adv. Phys.* 2008. V. 57, No 5. P. 457–537. <https://doi.org/10.1080/00018730802538522>.
4. *Zhang G., Li B.* Impacts of doping on thermal and thermoelectric properties of nanomaterials // *Nanoscale.* 2010. V. 2, No 7. P. 1058–1068. <https://doi.org/10.1039/C0NR00095G>.
5. *Cattaneo C.* Sur une forme de l'equation de la chaleur eliminant la paradoxe d'une propagation instantanee // *C. R. de l'Acad. des Sci.* 1958. T. 247. P. 431–433.
6. *Wang M., Cao B.-Y., Guo Z.-Y.* General heat conduction equations based on the thermomass theory // *Front. Heat Mass Transfer.* 2010. V. 1, No 1. Art. 013004. <https://doi.org/10.5098/hmt.v1.1.3004>.
7. *Sobolev S.L.* Rapid phase transformation under local non-equilibrium diffusion conditions // *Mater. Sci. Technol.* 2015. V. 31, No 13. Pt. A & B. P. 1607–1617. <https://doi.org/10.1179/1743284715Y.0000000051>.
8. *Лурье С.А., Белов П.А., Яновский Ю.Г.* О моделировании теплопереноса в динамически деформируемых средах // *МКМК.* 2000. Т. 6, № 3. С. 436–444.
9. *Belov V.N., Gorshkov A.G., Lurie S.A.* Variational model of nonholonomic 4D-media // *Mech. Solids.* 2006. V. 41, No 6. P. 22–35.
10. *Lurie S.A., Belov P.A.* On the nature of the relaxation time, the Maxwell–Cattaneo and Fourier law in the thermodynamics of a continuous medium, and the scale effects in thermal conductivity // *Continuum Mech. Thermodyn.* 2020. V. 32, No 4. P. 709–728. <https://doi.org/10.1007/s00161-018-0718-7>.
11. *Lomakin E.V., Lurie S.A., Belov P.A., Rabinskiy L.N.* On the generalized heat conduction laws in the reversible thermodynamics of a continuous medium // *Dokl. Phys.* 2018. V. 63, No 12. P. 503–507. <https://doi.org/10.1134/S102833581812011X>.
12. *Belov P.A., Lurie S.A.* On variation models of the irreversible processes in mechanics of solids and generalized hydrodynamics // *Lobachevskii J. Math.* 2019. V. 40, No 7. P. 896–910. <https://doi.org/10.1134/S1995080219070060>.
13. *Belov P.A., Lurie S.A., Dobryanskiy V.N.* Variational formulation of linear equations of coupled thermohydrodynamics and heat conductivity // *Lobachevskii J. Math.* 2020. V. 41, No 10. P. 1949–1963. <https://doi.org/10.1134/S1995080220100042>.

14. *Gusev A.A., Lurie S.A.* Wave-relaxation duality of heat propagation in Fermi–Pasta–Ulam chains // *Mod. Phys. Lett. B.* 2012. V. 26, No 22. P. 125–145. <https://doi.org/10.1142/S021798491250145X>.
15. *Седов Л.И., Эглит М.Э.* Построение неголономных моделей сплошных сред с учетом конечности деформаций и некоторых физико-химических эффектов // *Докл. АН СССР.* 1962. Т. 142, № 1. С. 54–57.
16. *Sedov L.I.* Mathematical methods for constructing new models of continuous media // *Russ. Math. Surv.* 1965. V. 20, No 5. P. 123–182. <https://doi.org/10.1070/RM1965v020n05ABEH001191>.
17. *Белов П.А., Лурье С.А.* Вариационная формулировка градиентной необратимой термодинамики // *Вестн. ПНИПУ. Механ.* 2023. № 5. С. 36–44.
18. *Lu Q., Li X., Zhang X., Lu M., Chen Y.* Perspective: Acoustic metamaterials in future engineering // *Engineering.* 2022. V. 17. P. 22–30. <https://doi.org/10.1016/j.eng.2022.04.020>.

Поступила в редакцию 21.08.2023

Принята к публикации 24.09.2023

Лурье Сергей Альбертович, главный научный сотрудник, доктор технических наук

Институт прикладной механики Российской академии наук (ИПРИМ РАН)

Ленинградский просп., д. 7, г. Москва, 125040, Россия

E-mail: salurie@mail.ru

Белов Пётр Анатольевич, ведущий научный сотрудник, доктор физико-математических наук

Институт прикладной механики Российской академии наук (ИПРИМ РАН)

Ленинградский просп., д. 7, г. Москва, 125040, Россия

E-mail: belovpa@yandex.ru

Волков Александр Владимирович, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник

Институт прикладной механики Российской академии наук (ИПРИМ РАН)

Ленинградский просп., д. 7, г. Москва, 125040, Россия

E-mail: volkov.9291@mail.ru

ORIGINAL ARTICLE

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.246-263

Variational Formulation of Thermomechanical Problems

S.A. Lurie*, P.A. Belov**, A.V. Volkov***

Institute of Applied Mechanics, Russian Academy of Sciences, Moscow, 125040 Russia

E-mail: *salurie@mail.ru, **belovpa@yandex.ru, ***volkov.9291@mail.ru

Received August 21, 2023; Accepted September 24, 2023

Abstract

This article proposes that a 4D space-time continuum is used for building variational thermomechanical continuum models. In order to identify physical constants in reversible processes, physically justified hypotheses were formulated. They are the hypotheses of complementary shear stress, classical dependence of momentum on velocity, and heat flow potentiality (generalized Maxwell–Cattaneo law). The Duhamel–Neumann law was assumed to be classical. In the considered model, the generalized Maxwell–Cattaneo and Duhamel–Neumann laws were not introduced phenomenologically. They were derived from the compatibility equations by excluding thermal potential from the constitutive equations for temperature, heat flow, and pressure. Dissipation channels were considered as the simplest non-integrable variational forms, which are linear in the variations of arguments. As a result, a variational principle that generalizes L.I. Sedov’s principle was developed. It is a consequence of the virtual work principle and termed as the difference between the variation of the Lagrangian of reversible thermomechanical processes and the algebraic sum of dissipation channels. It was proved that for the classical thermomechanical processes, with second-order differential equations, there can only exist six dissipation channels. Two of them determine dissipation in an uncoupled system – in the equations of motion and heat balance. The remaining four channels define coupling effects in coupled problems of dissipative thermomechanics.

Keywords: thermoelasticity, heat balance, thermomechanical processes, reversibility and dissipativity, generalized Maxwell–Cattaneo law, generalised Duhamel–Neumann law, identification of thermoelastic moduli

Acknowledgments. This study was performed under the financial support of the Russian Science Foundation (project no. 23-11-00275) for the Institute of Applied Mechanics, Russian Academy of Sciences.

References

1. Joseph D.D., Preziosi L. Heat waves. *Rev. Mod. Phys.*, 1989, vol. 61, no. 1, pp. 41–73. <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.61.41>.
2. Lepri S., Livi R., Politi A. Thermal conduction in classical low-dimensional lattices. *Phys. Rep.*, 2003, vol. 377, no. 1, pp. 1–80. [https://doi.org/10.1016/S0370-1573\(02\)00558-6](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(02)00558-6).
3. Dhar A. Heat transport in low-dimensional systems. *Adv. Phys.*, 2008, vol. 57, no. 5, pp. 457–537. <https://doi.org/10.1080/00018730802538522>.
4. Zhang G., Li B. Impacts of doping on thermal and thermoelectric properties of nanomaterials. *Nanoscale*, 2010, vol. 2, no. 7, pp. 1058–1068. <https://doi.org/10.1039/C0NR00095G>.

5. Cattaneo C. Sur une forme de l'équation de la chaleur éliminant la paradox de d'une propagation instantanée. *C. R. de l'Acad. des Sci.*, 1958, t. 247, p. 431–433. (In French)
6. Wang M., Cao B.-Y., Guo Z.-Y. General heat conduction equations based on the thermomass theory. *Front. Heat Mass Transfer.*, 2010, vol. 1, no. 1, art. 013004. <https://doi.org/10.5098/hmt.v1.1.3004>.
7. Sobolev S.L. Rapid phase transformation under local non-equilibrium diffusion conditions. *Mater. Sci. Technol.*, 2015, vol. 31, no. 13, pt. A & B, pp. 1607–1617. <https://doi.org/10.1179/1743284715Y.0000000051>.
8. Lurie S.A., Belov P.A., Yanovskii Yu.G. On simulation of heat transmission in dynamically deformed media. *Mekh. Kompoz. Mater. Konstr.*, 2000, vol. 6, no. 3, pp. 436–444. (In Russian)
9. Belov V.N., Gorshkov A.G., Lurie S.A. Variational model of nonholonomic 4D-media. *Mech. Solids*, 2006, vol. 41, no. 6, pp. 22–35.
10. Lurie S.A., Belov P.A. On the nature of the relaxation time, the Maxwell–Cattaneo and Fourier law in the thermodynamics of a continuous medium, and the scale effects in thermal conductivity. *Continuum Mech. Thermodyn.*, 2020, vol. 32, no. 4, pp. 709–728. <https://doi.org/10.1007/s00161-018-0718-7>.
11. Lomakin E.V., Lurie S.A., Belov P.A., Rabinskiy L.N. On the generalized heat conduction laws in the reversible thermodynamics of a continuous medium. *Dokl. Phys.*, 2018, vol. 63, no. 12, pp. 503–507. <https://doi.org/10.1134/S102833581812011X>.
12. Belov P.A., Lurie S.A. On variation models of the irreversible processes in mechanics of solids and generalized hydrodynamics. *Lobachevskii J. Math.*, 2019, vol. 40, no. 7, pp. 896–910. <https://doi.org/10.1134/S1995080219070060>.
13. Belov P.A., Lurie S.A., Dobryanskiy V.N. Variational formulation of linear equations of coupled thermohydrodynamics and heat conductivity. *Lobachevskii J. Math.*, 2020, vol. 41, no. 10, pp. 1949–1963. <https://doi.org/10.1134/S1995080220100042>.
14. Gusev A.A., Lurie S.A. Wave-relaxation duality of heat propagation in Fermi–Pasta–Ulam chains. *Mod. Phys. Lett. B.*, 2012, vol. 26, no. 22, pp. 125–145. <https://doi.org/10.1142/S021798491250145X>.
15. Sedov L.I., Eglit M.E. Construction of nonholonomic models of continuous media with allowance for the finite nature of deformations and certain physico-chemical effects. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 1962, vol. 142, no. 1, pp. 54–57. (In Russian)
16. Sedov L.I. Mathematical methods for constructing new models of continuous media. *Russ. Math. Surv.*, 1965, vol. 20, no. 5, pp. 123–182. <https://doi.org/10.1070/RM1965v020n05ABEH001191>.
17. Belov P.A., Lurie S.A. Variational formulation of gradient irreversible thermodynamics. *Vestn. PNIPU. Mekh.*, 2023, no. 5, pp. 36–44. (In Russian)
18. Lu Q., Li X., Zhang X., Lu M., Chen Y. Perspective: Acoustic metamaterials in future engineering. *Engineering*, 2022, vol. 17, pp. 22–30. <https://doi.org/10.1016/j.eng.2022.04.020>.

⟨ **Для цитирования:** Лурье С.А., Белов П.А., Волков А.В. Вариационная постановка задач термомеханики // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. 2023. Т. 165, кн. 3. С. 246–263. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.246-263>. ⟩

⟨ **For citation:** Lurie S.A., Belov P.A., Volkov A.V. Variational formulation of thermomechanical problems. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2023, vol. 165, no. 3, pp. 246–263. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.246-263>. (In Russian) ⟩

ОРИГИНАЛЬНАЯ СТАТЬЯ

УДК 004.822

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.264-281

СИСТЕМА АВТОМАТИЧЕСКОГО ПОСТРОЕНИЯ ГРАФОВ ЗНАНИЙ МАТЕМАТИЧЕСКИХ ДОКУМЕНТОВ

О. А. Невзорова, Б. Т. Гизатуллин

Казанский (Приволжский) федеральный университет, г. Казань, 420008, Россия

Аннотация

В настоящей работе представлен процесс создания системы автоматизированного построения графов знаний для коллекций математических документов в формате $\text{\LaTeX}$. Разработана онтология MathCollectionOntology, определяющая типы объектов и связей в графах знаний. Представлены инструменты, включающие методы извлечения математических терминов, выделения тематик документов, извлечения сущностей из $\text{\LaTeX}$ -кода, а также инструменты для вычисления статистических параметров графа.

Среди выделяемых сущностей: математические термины, тематики, полученные методом латентного размещения Дирихле, коды УДК, использованные формулы, аффилиации авторов, использованная литература и другие. Каждый извлеченный объект записывается в граф знаний с использованием определенных типов связей, выделенных в разработанной онтологии MathCollectionOntology.

С использованием разработанной системы проведены построение и анализ графа знаний для коллекции научных статей журнала «Известия высших учебных заведений. Математика», включающей 1114 русскоязычных статей в формате $\text{\LaTeX}$. Выделен терминологический состав тематик документов. Получены количественные параметры построенного графа знаний коллекции.

Ключевые слова: построение графа знаний, открытые связанные данные, тематическое моделирование, математическая статья, обработка текстов

Введение

Цифровое пространство математических знаний, как часть единого цифрового пространства научных знаний, формируется сегодня в соответствии с концепциями построения Всемирной цифровой математической библиотеки (World Digital Mathematics Library – WDML), Глобальной цифровой математической библиотеки (Global Digital Mathematics Library – GDML), Европейской цифровой математической библиотеки (The European Digital Mathematics Library – EuDML) и основных направлений концепции Big Math [1–4]. Цифровые математические библиотеки (Digital Mathematical Library, DML) рассматриваются в названных концепциях в качестве основного интегратора математического знания, представленного в научных документах, опубликованных за весь период развития математики [5–7].

Графы знаний предоставляют гибкую структуру хранения данных. Они легко адаптируются к изменениям в структуре данных, позволяя вносить изменения, добавлять новые связи без значительных вычислительных затрат. Также организация данных в виде графа знаний позволяет естественным образом представлять

взаимосвязи между объектами в данных, выявлять и анализировать сложные или скрытые зависимости.

Глубокая специализация современных математических статей, их многообразие и быстрый темп развития математического знания требуют более гибких методов управления информацией. В этом контексте использование графов знаний представляет собой перспективный подход, позволяющий эффективно моделировать и анализировать структуру знаний и связи внутри сборников научных работ.

Таким образом, построение графов знаний в области математики является масштабной задачей и перспективным научным направлением. Однако научное математическое знание представлено в виде графов знаний лишь фрагментарно, и актуальной задачей является построение математического знания в виде графа знаний для уже существующих и новых математических ресурсов.

В статье рассмотрены общий подход к построению графа знаний на основе данных математической коллекции журнальных статей и программные инструменты, реализующие поставленную задачу.

Статья организована следующим образом. В разделе 1 дан краткий обзор близких работ, в разделе 2 представлены основные используемые модели и методы. В разделе 3 рассмотрена реализация программной системы построения графов знаний. В разделе 4 представлен анализ построенного графа знаний коллекции статей журнала «Известия высших учебных заведений. Математика». В заключении приведены основные выводы и перспективы дальнейших исследований и применения разработанной системы.

1. Близкие работы

Как известно, граф знаний – это граф данных, предназначенный для накопления и передачи знаний о реальном мире. Узлы такого графа представляют интересующие объекты, а ребра – отношения между ними.

В [8] выделены два типа графов знаний, применимых на практике: это открытые графы знаний и графы знаний предприятия.

Открытые графы знаний публикуются в интернете, что делает их содержание доступным общественности. Наиболее яркими примерами открытых графов являются DBpedia [9], Freebase [10], Wikidata [11], YAGO [12] и NELL [13].

Корпоративные графы знаний обычно являются внутренним ресурсом компаний и активно используются в коммерческих целях [14], в частности, в таких направлениях, как поисковые системы (например, Bing, Google), коммерция (например, Airbnb, Amazon, eBay, Uber), социальные сети (например, Facebook, LinkedIn).

Открытые графы знаний также создаются для конкретных областей. Наибольший интерес для нашего исследования представляет задача построения графов знаний на основе публикаций, относящихся к академической литературе в различных областях (например, OpenCitations [15], SciGraph [16], Microsoft Academic Knowledge Graph [17], открытый граф знаний для платформы публикаций [18]).

Для создания графов знаний используются нисходящий и восходящий подходы [19–21]. При нисходящем подходе (top-down approach) моделируется структура графа знаний, после чего сам граф пополняется данными. Восходящий подход (bottom-up approach) предполагает, что структура графа знаний создается на основе самих данных.

Данные для графа знаний формируются на основе информации, извлеченной из документов, полученных как из внешних источников, так и как результат ручной обработки информации с привлечением экспертов из соответствующих предметных областей [22–24].

В последнее время графы знаний строятся с использованием больших языковых моделей (Large Language Models, LLM) [25]. С одной стороны, большие языковые модели применяются для создания и пополнения графов знаний [26, 27]. С другой стороны, графы знаний используются для проверки и интерпретации ответов языковых моделей.

Источниками информации для формирования графа знаний в области профессиональной математики служат как общие графы знаний, так и документы электронных коллекций цифровых библиотек и онтологии предметных областей.

Многие разделы математического знания представлены в онтологии профессионального математического знания $\text{OntoMath}^{\text{PRO}}$ и образовательной математической онтологии $\text{OntoMath}^{\text{Edu}}$ [28–30]. Можно также отметить некоторые частные решения по построению графов знаний в области математики. Так, в [31] на примере онтологии семантической библиотеки LibMeta рассмотрена технология формирования графа знаний некоторых математических приложений. В работе [32] представлен граф математических знаний Math-KG, автоматически формируемый методами обработки естественного языка на основе китайского корпуса Baidu Baike и Википедии.

В настоящей статье описаны нисходящий подход и результаты построения графа знаний на основе данных математической коллекции статей журнала «Известия ВУЗов. Математика». Рассмотрены также реализации программных инструментов, обеспечивающих решение поставленной задачи.

2. Используемые модели и методы

2.1. Граф знаний. Граф знаний можно представить как граф $G = (V, E)$, в котором ребра и узлы могут иметь различные типы. Так, для ребра $e_i \in E$ его тип $\tau(e_i) = \alpha$ может отличаться от типа ребра $e_j \in E$: $\tau(e_j) = \beta \neq \alpha$.

Обычно граф знаний – ориентированный. Его ребра представляют собой направленное отношение, а различные типы ребер отражают разные семантические связи.

2.2. Модель RDF. RDF (Resource Description Framework)¹ представляет собой модель для описания ресурсов в Семантическом вебе. Мы используем концепцию триплетов, связанную с RDF. Каждый триплет – это упорядоченная тройка $t = (s, p, o)$, где

- p – предикат, представленный с помощью универсального идентификатора ресурса URI (Uniform Resource Identifier); он определяет направленное отношение между s и o ;
- s – субъект направленного отношения p , задается с помощью URI;
- o – объект направленного отношения p , является либо ресурсом URI, либо литералом.

Использование URI обеспечивает уникальную идентификацию ресурсов, а также позволяет обозначить местоположение и/или имя ресурса.

Сразу нужно отметить, что обычно концепция триплета расширяется, предоставляя возможность описывать различные свойства предикатов, такие как транзитивность, симметричность, рефлексивность и ряд других.

RDF – это абстрактная логическая модель, которая может использоваться для представления графа знаний. Для ее реализации в настоящей работе применен

¹<https://www.w3.org/RDF/>

формат RDF/XML, который обеспечивает структурированное представление данных в виде XML-документов согласно принципам RDF.

2.3. Тематическое моделирование на основе модели LDA. Задача тематического моделирования – определить тематики документов в наборе текстовых данных, а также для каждой тематики определить, какие термины ее характеризуют.

Одними из выделяемых из входного набора сущностей являются тематики документов, полученные методом латентного размещения Дирихле (Latent Dirichlet allocation, LDA).

LDA – это вероятностная модель, используемая для анализа семантической структуры коллекции документов, которая основана на распределении Дирихле и мультиномиальном распределении. Каждый документ d характеризуется распределением Дирихле θ_d с параметром α . Предполагается, что переменная θ , представляющая собой L -мерную случайную величину Дирихле (L – заранее определенное число тем), может принимать значения в стандартном $(L - 1)$ -симплексе и имеет следующую плотность вероятностей на этом симплексе (параметр α тоже L -мерный) [34]:

$$p(\theta|\alpha) = \frac{\Gamma\left(\sum_{i=1}^L \alpha_i\right)}{\prod_{i=1}^L \Gamma(\alpha_i)} \prod_{i=1}^L \theta_i^{\alpha_i-1}.$$

При подборе параметров мы увеличиваем правдоподобие имеющейся коллекции документов. Параметры LDA можно подбирать разными способами, например, с использованием сэмпирования по Гиббсу [35].

2.4. Оценка тематического моделирования. Для оценки проведенного тематического моделирования используют метрики когерентности. Они измеряют, насколько хорошо слова в одной теме согласуются и поддерживают друг друга. В данной работе мы используем метрику C_V Coherence, предложенную в исследовании [33].

Расчет метрики C_V Coherence основан на 4-х шагах.

- Сегментация данных. Здесь набор слов W разделяется на куски, которые далее сравниваются друг с другом. В контексте метрики C_V отдельное слово сравнивается с общим набором слов. Так, множество сравниваемых пар представимо как $S = \{(W', W) \mid W' = \{w_i\}; w_i \in W\}$.
- Оценка вероятностей. Для вычисления вероятностей появления отдельных слов $p(w_i), w_i \in W$ или вероятности совместного появления нескольких слов $p(w_{i1}, w_{i2}, \dots, w_{ik})$ можно применить метод булевого документа. Этот метод определяет вероятность как отношение числа документов, включающих указанное слово или несколько слов, к общему числу документов.

В контексте C_V Coherence используется булевское скользящее окно: для каждого окна размером 110 термов создается виртуальный документ, и вероятности появления слов вычисляются на основе общего числа виртуальных документов. Такой метод стремится учесть распределение слов в контексте их близости.

- Мера подтверждения (confirmation measure). Для каждой пары $S_i \in S$ она основана на векторах контекстов, которые определяются как

$$v(W') = \left\{ \sum_{w_i \in W'} \text{NPMI}(w_i, w_j) \right\}_{j=1 \dots |W|},$$

где

$$\text{NPMI}(w_i, w_j) = \frac{\log\left(\frac{P(w_i, w_j) + \varepsilon}{P(w_i) \cdot P(w_j)}\right)}{-\log(P(w_i, w_j) + \varepsilon)}.$$

Затем для векторов вычисляется косинусная мера

$$m_{S_i}(\vec{u}, \vec{w}) = \frac{\sum_{i=1}^{|W|} u_i w_i}{\|\vec{u}\|_2 \cdot \|\vec{w}\|_2}.$$

- Агрегация. Затем на посчитанных мерах подтверждений $m = \{m_{S_1}, \dots, m_{S_{|S|}}\}$ вычисляется арифметическое среднее, которое будет результатом расчета метрики C_V Coherence.

2.5. Онтология профессиональной математики OntoMath^{PRO}. Онтология профессионального математического знания ^{PRO} организована в виде двух иерархий: иерархии областей математики и иерархии объектов математического знания. Иерархия разделов математики включает такие разделы, как *математическая логика, теория множеств, алгебра, геометрия, топология* и др. Иерархия элементов математического знания включает общие математические понятия, такие как *множество, функция, интеграл, элементарное событие* и др.

В онтологии определены пять типов отношений между концептами (выделены курсивом).

- Класс $\Rightarrow$ Подкласс (пример: *Уравнение смешанного типа $\Rightarrow$ Уравнение Трикоми*).
- Область математики $\Rightarrow$ Математический объект (*Теория дифференциальных уравнений $\Rightarrow$ Уравнение Гельмгольца*).
- Определяется с помощью (*Символ Кристоффеля $\Rightarrow$ Связность*).
- Ассоциативная связь (*Циклический итерационный метод Чебышева $\Rightarrow$ Численное решение системы линейных уравнений*).
- Задача $\Rightarrow$ Метод решения (*Система линейных уравнений $\Rightarrow$ Метод Гаусса*).

Описание концепта содержит: название на русском и английском языках, определение, связи с другими концептами и ссылки на внешние ресурсы из наборов облака Открытых связанных данных (LOD).

3. Реализация инструментов

В настоящем разделе описана реализация инструментов автоматического формирования графов знаний для наборов математических документов.

3.1. Онтология MathCollectionOntology. Для определения типов объектов и связей в создаваемых графах знаний была разработана онтология представления математических коллекций MathCollectionOntology (далее будет использован префикс mco). Классы и свойства онтологии были выбраны на основе анализа шаблонов $\LaTeX$ -документов, а также анализа структуры метаданных и семантических свойств документов.

Далее указаны наиболее важные классы онтологии и их выравнивание на внешние онтологии, такие как DBO², BIBO³, Dublin Core ontology⁴.

²<https://www.dbpedia.org/resources/ontology/>

³<http://purl.org/ontology/bibo/>

⁴<http://purl.org/dc/terms/>

- Класс коллекции математических статей: «mco:collection». Выравнивание: «owl:equivalentClass bibo:Collection».
- Класс текстового документа: «mco:text». Выравнивание: «owl:equivalentClass bibo:Article».
- Класс автора: «mco:creator». Выравнивание: «rdfs:subClassOf dterms:Agent».
- Класс математической статьи: «mco:article». Является подклассом для «mco:text». Выравнивание: «rdfs:subClassOf bibo:AcademicArticle».
- Класс аффилиации автора: «mco:affiliation». Выравнивание: «owl:equivalentClass dbo:Organisation».

Также выделены свойства, которые определяют типы связей в формируемых графах знаний. Ниже представлены наиболее важные выделенные типы связей.

- «mco:has_omp_term» указывает, что в статье встречается математический термин из онтологии OntoMath^{PRO}. Выравнивание: «owl:equivalentProperty dterms:subject».
- «mco:use_formula» указывает на формулу, использованную в тексте.
- «mco:has_lda_topic» указывает на тематику текста, полученную с помощью LDA. Выравнивание: «rdfs:subPropertyOf dterms:subject».
- «mco:has_publication_date» указывает на дату публикации математической статьи. Выравнивание: «rdfs:subPropertyOf dterms:date».
- «mco:has_title» указывает на название математической статьи. Выравнивание: «owl:equivalentProperty dterms:title».
- «mco:creator_name» указывает имя автора.
- «mco:has_udc_code» указывает код классификации по Универсальной десятичной классификации (УДК) математической статьи. Выравнивание: «rdfs:subPropertyOf dterms:subject».
- «mco:created_by» указывает автора текстового документа. Выравнивание: «owl:equivalentProperty dbo:creator».
- «mco:has_bibliographic_citation» указывает, что математическая статья цитируется в другом текстовом документе. Выравнивание: «owl:equivalentProperty dterms:References, bibo:cites».
- «mco:has_affiliation» указывает аффилиацию автора. Выравнивание: «owl:equivalentProperty dbo:affiliation».
- «mco:affiliation_name» указывает название аффилиации.

3.2. Общая архитектура системы построения графов знаний. Коллекция математических статей, которая поступает в систему, проходит обработку по схеме, представленной на рис. 1.

Коллекция проходит несколько этапов обработки.

- Из коллекции извлекаются документы в $\text{\LaTeX}$ -формате.
- Выделяются необходимые сущности из $\text{\LaTeX}$ -кода.

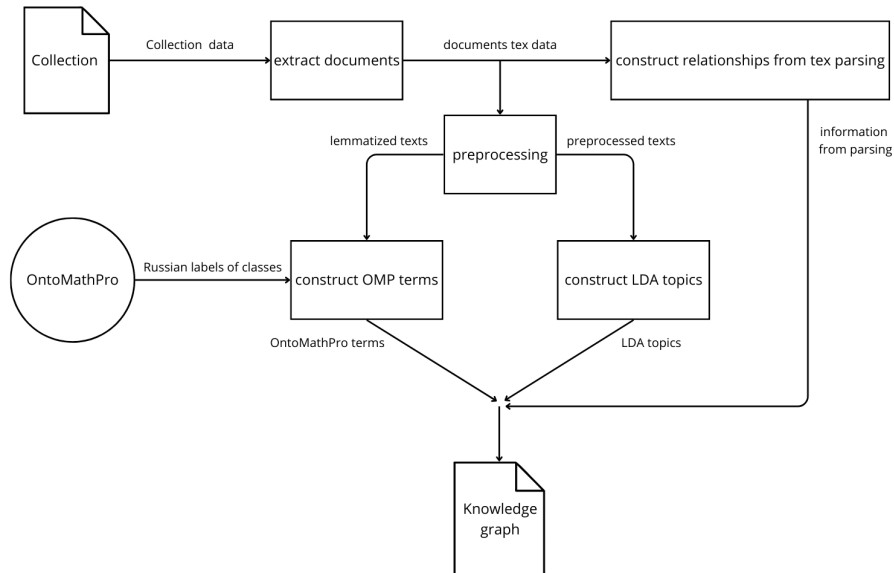


Рис. 1. Схема обработки набора математических статей

- Из лемматизированных текстов с использованием онтологии $\text{OntoMath}^{\text{PRO}}$ извлекаются математические термины.
- Из предобработанных (лемматизированных без стоп-слов) текстов извлекаются тематики LDA.

Все сущности, выделенные на этих этапах, записываются в граф знаний.

На рис. 2 представлены общая архитектура веб-приложения, а также основная структура проекта и базовые зависимости.

3.3. Инструменты выделения сущностей из $\text{\LaTeX}$ -кода. К извлекаемым элементам из шаблонов $\text{\LaTeX}$ -документов относятся: УДК-коды, даты публикации, заголовки, имена авторов, аффилиации авторов, библиографические ссылки, формулы, текстовое содержимое статей.

Рассмотрим метод извлечения кодов УДК математической статьи, основанный на поиске и обработке тега «udk».

```

def get_udc_code(self) -> Union[List[str], None]:
    start = self.text_tex_lowercase.find('\udk') + 5
    if start == 4:
        # no \udk tag
        return None
    end = start + self.text_tex[start:].find('}')
    rough_udk_list = self.text_tex[start:end].split(':')
    udk_list = []
    for el in rough_udk_list:
        # if there are extra characters, delete them
        t = ''.join(char for char in el if char.isdigit() or char == '.')
        if t:
            udk_list.append(t)
    return udk_list

```

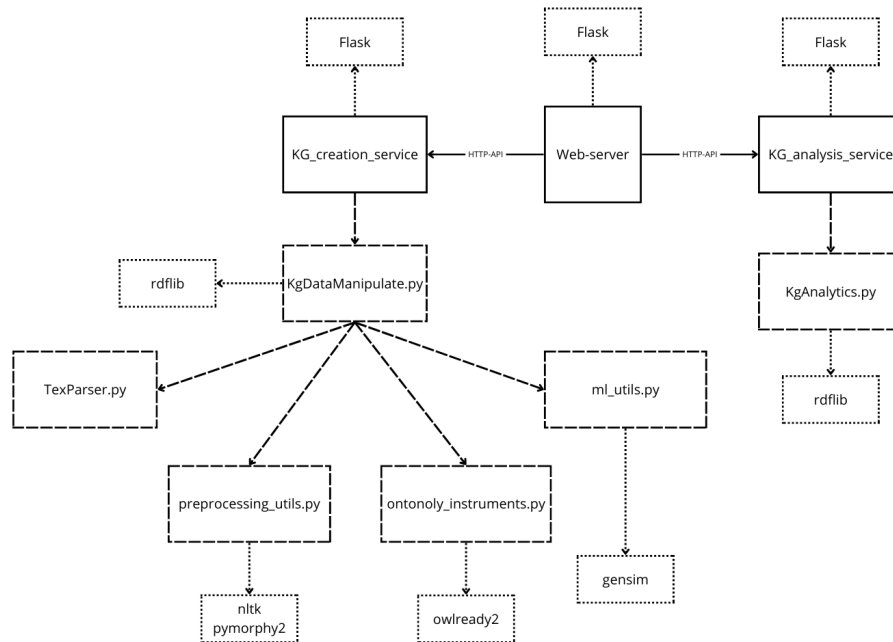


Рис. 2. Архитектура системы и структура кода. Прямоугольники с границей в виде сплошной линии обозначают основные веб-сервисы системы. Сплошные стрелки обозначают связь посредством HTTP-API. Прямоугольники с пунктирной линией задают основные модули и классы. Пунктирные стрелки указывают, с использованием каких внутренних программных компонентов реализуется блок, откуда исходит стрелка. Прямоугольники с границей в виде точек указывают на основные внешние зависимости. Точечные линии указывают, с использованием каких внешних библиотек (rdflib, nltk, owlready2, pymorphy2) и фреймворков (Flask) реализован компонент/сервис.

Метод выполняет поиск тега «\udk». Если тег не обнаружен, возвращается значение None. В противном случае метод извлекает все содержимое тега «\udk», разделяет текст по символу «:» и сохраняет результат в виде списка. Для предотвращения возможных пробелов и нежелательных символов в теге из текста тега извлекаются только цифры и точки. В конечном итоге формируется список, содержащий коды УДК статьи.

При выделении формул с помощью регулярного выражения отыскивались подстроки, заключенные в «\$», и фильтровались по длине:

```

def get_formulas(self) -> List[str]:
    res = [math_expression.replace('\0', '') for math_expression in
            re.findall(r'\$[^\$]*\$', self.text_tex)
            if len(math_expression) > 3 and '=' in math_expression
            and len(math_expression) <= 150]
    return res
  
```

Другие 6 методов также основаны либо на регулярных выражениях, либо на обработке соответствующих L^AT_EX-тегов. Однако в ряде случаев требовался более сложный алгоритм обработки, учитывающий различные варианты шаблонов данных.

3.4. Предобработка документов. Выделение сущностей и связей для графа знаний проводилось в несколько этапов, каждый из которых ожидает данные с разной глубиной обработки. Так, парсинг $\text{\LaTeX}$ -кода происходил на документах без обработки. Математические термины выделялись на лемматизированных текстах документов без вставок кода верстки. А выделение тематик происходило на лемматизированных документах без стоп-слов.

3.5. Инструменты выделения математических терминов. Для выделения математических терминов были использованы классы (концепты) онтологии математического знания $\text{OntoMath}^{\text{PRO}}$. Проводилась лемматизация русскоязычных лейблов этих классов. Затем для каждого лемматизированного документа набора данных проверялось, присутствует ли в нем каждый из лемматизированных лейблов. В граф знаний записывались оригинальные версии найденных лейблов.

3.6. Инструменты выделения тематик. Разработаны инструменты, которые для предобработанных документов выделяют тематики с использованием метода LDA, для которого по расчетной сетке подбираются гиперпараметры. К гиперпараметрам относятся два параметра, связанных с формированием словаря, и один параметр – количество тем. Параметры, связанные со словарем, включают ограничение на максимальную долю документов, где определенный терм может встречаться, чтобы быть включенным в словарь, а также минимальное количество документов, в которых терм должен быть представлен.

Процесс оптимизации гиперпараметров осуществлялся путем максимизации метрики C_V Coherence на сетке значений гиперпараметров. Для повышения эффективности процесса была добавлена возможность использования механизма, в котором шаги перебора количества тем уменьшаются по мере продвижения по сетке.

В этом механизме при фиксации гиперпараметров для словаря использован более сложный метод подбора количества тем. Этот метод начинает с более крупных шагов и затем выбирает две точки, между которыми лежит максимум. Дальнейший поиск параметров тем происходит в этом диапазоне с последующим уменьшением шага перебора. Такой механизм существенно ускоряет процесс подбора гиперпараметров, хотя в некоторых случаях может получать параметры, соответствующие не наибольшему максимуму перебираемой сетки.

После завершения подбора для количества тем параметры словаря изменяются, и процесс повторяется для следующей итерации.

На рис. 3 представлен график перебора количества тем в диапазоне (1, 33) с шагом 5 при фиксированных параметрах словаря для тестового набора математических статей. Для этого случая дальнейший перебор количества тем будет вестись в диапазоне (7, 17), так как внутри этого диапазона лежит наибольшее значение метрики.

Разработанные инструменты позволяют как подбирать параметры на некоторой сетке точно, то есть с полным перебором всех значений, так и подбирать параметры через механизм, описанный выше.

3.7. Инструменты расчета статистических параметров графа. Были разработаны инструменты для вычисления различных количественных параметров графа, таких как общее число связей в графе, распределение типов связей по документам коллекции, индекс цитируемости статей внутри коллекции, число уникальных авторов, индекс покрытия статьи математическими терминами, распределение УДК-кодов по статьям коллекции. Такие статистики были посчитаны с использованием SPARQL-запросов и библиотеки `rdflib`.

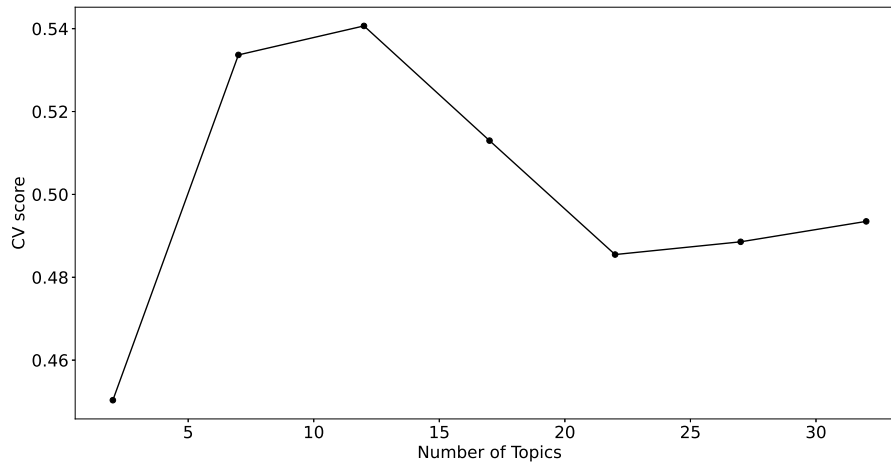


Рис. 3. Перебор количества тем с шагом 5 для LDA

3.8. Веб-приложение. Разработана программная система, обеспечивающая доступ к инструментам построения и анализа графа знаний посредством веб-интерфейса. Этот интерфейс позволяет настроить информацию о коллекции математических статей, задать настройки для построения графа, в частности, выбрать механизм подбора количества тем в LDA. Это веб-приложение взаимодействует с двумя HTTP-API микросервисами: `KG_creation_service` и `KG_analysis_service` (см. рис. 2).

На вход в виде JSON-объекта микросервису `KG_creation_service` подаются информация о нахождении коллекции статей, а также настройки для построения графа, а на выходе возвращается информация о пути к графу знаний, сформированному на сервере. Сам API написан на фреймворке Flask с использованием технологий REST. Микросервис `KG_analysis_service` позволяет рассчитывать количественные параметры указанного графа.

4. Анализ графа знаний коллекции статей журнала «Известия высших учебных заведений. Математика»

С использованием разработанной системы было проведено построение графа знаний коллекции математических статей журнала «Известия высших учебных заведений. Математика». Исследуемая коллекция содержит 1114 уникальных статей в $\text{\LaTeX}$ -формате за 1997–2005 гг.

В таблице 1 представлено распределение тематик коллекции, полученных методом LDA.

Всего в графе знаний исследуемой коллекции построено 203481 связь. Количество связей внутри графа по некоторым типам связей показано в таблице 2.

Заключение

Представлен комплексный подход к разработке системы автоматического построения графов знаний коллекций математических статей.

Разработана онтология представления математических коллекций `MathCollectionOntology`, классы и отношения которой используются для построения графов знаний математических коллекций.

Табл. 1

Распределение тематик в коллекции

Номер темы	Число статей	Характерные слова (top 5, после лемматизации)
1	293	Кривая, собственный, краевой, поверхность, Коши.
2	159	Подпространство, банахов, приближение, мера, приблизить.
3	148	Выпуклый, функционал, обобщённый, найдись, вариационный.
4	105	Поле, связность, многообразие, тензор, кривизна.
5	89	Устойчивость, алгоритм, процесс, устойчивый, время.
6	78	Схема, разностный, сетка, итерационный, краевой.
7	65	Алгебра, базис, многообразие, тождество, решётка.
8	58	Группа, модуль, подгруппа, кольцо, полугруппа.
9	50	Многообразие, структура, группа, расслоение, слой.
10	36	Вершина, граф, многогранник, шаг, ребро.
11	33	Управление, семейство, оптимальный, функционал, процедура.

Табл. 2

Распределение связей по типам

Тип связи	Количество связей
mco:has_omp_term	81 465
mco:use_formula	56 935
mco:has_bibliographic_citation	10 545
mco:has_lda_topic	5 298
mco:has_udc_code	1 229

Представлены инструменты выделения метаданных из L^AT_EX-кода статей, а также инструменты выделения тематик и извлечения математических терминов.

Создано веб-приложение, которое предоставляет удобный интерфейс для доступа к инструментам анализа и визуализации графа знаний.

Построен граф знаний для коллекции статей журнала «Известия высших учебных заведений. Математика» с использованием разработанной веб-системы. Получены количественные характеристики графа знаний коллекции, а также выделен терминологический состав тематик документов.

Одним из перспективных направлений будущих исследований является создание эмбедингов графов знаний математических коллекций для более глубокого исследования взаимосвязей объектов графа. Кроме того, планируются построение графов знаний для коллекций на разных языках и создание межъязыковых связей на основе содержания документов.

Графы, создаваемые разработанными инструментами, могут применяться в прикладных приложениях, таких как рекомендательные системы, системы назначения УДК-кодов, системы поиска.

Благодарности. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, проект 21-11-00105.

Литература

1. *National Research Council*. Developing a 21st Century Global Library for Mathematics Research. Washington, DC: Natl. Acad. Press, 2014. 142 p. <https://doi.org/10.17226/18619>.
2. *Ion P.D.F., Watt S.M.* The Global Digital Mathematics Library and the International Mathematical Knowledge Trust // CICM 2017: Intelligent Computer Mathematics / Ed. by H. Geuvers, M. England, O. Hasan, F. Rabe, O. Teschke. Ser.: Lecture Notes in Computer Science. V. 10383. Cham: Springer, 2017. P. 56–69. https://doi.org/10.1007/978-3-319-62075-6_5.
3. *Bouche T., Rákosnik J.* Report on the EuDML External Cooperation Model // Proc. Joint Math. Meet. AMS Special Session. San Diego, 2013. P. 99–108. URL: https://www.emis.de/proceedings/TIEP2013/07bouche_rakosnik.pdf.
4. *Carette J., Farmer W.M., Kohlhase M., Rabe F.* Big math and the one-brain barrier: The tetrapod model of mathematical knowledge // Math. Intell. 2021. V. 43. P. 78–87. <https://doi.org/10.1007/s00283-020-10006-0>.
5. Communicating Mathematics in the Digital Era, 1st ed. / Ed. by J. Borwein, E.M. Rocha, J.F. Rodrigues. Wellesley, MA: A K Peters, CRC Press, 2008. 325 p. <https://doi.org/10.1201/b10587>.
6. *Bouche T.* Digital mathematics libraries: The good, the bad, the ugly // Math. Comput. Sci. 2010. V. 3. P. 227–241. <https://doi.org/10.1007/s11786-010-0029-2>.
7. *Elizarov A.M., Lipachev E.K., Zuev D.S.* Digital mathematical libraries: Overview of implementations and content management services // CEUR Workshop Proc. 2017. V. 2022. P. 317–325. <https://ceur-ws.org/Vol-2022/paper49.pdf>.
8. *Hogan A., Gutierrez C., Cochez M., de Melo G., Kirrane S., Polleres A., Navigli R., Ngomo A.-C. N., Rashid S. M., Schmelzeisen L., Staab S., Blomqvist E., d'Amato C., Labra Gayo J. E., Neumaier S., Rula A., Sequeda J., Zimmermann A.* Knowledge Graphs. Ser.: Synthesis Lectures on Data, Semantics, and Knowledge. Cham: Springer, 2022. xix, 237 p. <https://doi.org/10.2200/S01125ED1V01Y202109DSK022>.
9. *Lehmann J., Isele R., Jakob M., Jentzsch A., Kontokostas D., Mendes P. N., Hellmann S., Morsey M., Kleef P. V., Auer S., Bizer C.* DBpedia – A large-scale, multilingual knowledge base extracted from Wikipedia // Semantic Web. 2015. V. 6, No 2. P. 167–195. <https://doi.org/10.3233/SW-140134>.
10. *Bollacker K., Cook R., Tufts P.* Freebase: A shared database of structured general human knowledge // Proc. 22nd Natl. Conf. on Artificial Intelligence. Vancouver: AAAI Press, 2007. V. 2. P. 1962–1963.
11. *Vrandečić D., Krötzsch M.* Wikidata: A free collaborative knowledge base // Commun. ACM. 2014. V. 57, No 10. P. 78–85. <https://doi.org/10.1145/2629489>.
12. *Hoffart J., Suchanek F.M., Berberich K., Lewis-Kelham E., de Melo G., Weikum G.* YAGO2: Exploring and querying world knowledge in time, space, context, and many languages // Proc. 20th Int. World Wide Web Conf. Hyderabad, 2011. P. 229–232. <https://doi.org/10.1145/1963192.1963296>.
13. *Carlson A., Betteridge J., Wang R.C., Hruschka E.R., Mitchell T.M.* Coupled semi-supervised learning for information extraction // Proc. 3rd ACM Int. Conf. on Web Search and Data Mining. New York, NY: Assoc. Comput. Mach., 2010. P. 101–110. <https://doi.org/10.1145/1718487.1718501>.
14. *Noy N., Gao Y., Jain A., Narayanan A., Patterson A., Taylor J.* Industry-scale knowledge graphs: Lessons and challenges // Commun. ACM. 2019. V. 62, No 8. P. 36–43. URL: <https://doi.org/10.1145/3331166>.

15. *Peroni S., Shotton D.M., Vitali F.* One year of the OpenCitations Corpus: Releasing RDF-based scholarly citation data into the public domain // ISWC 2017: The Semantic Web – ISWC 2017 / Ed. by C. d’Amato, M. Fernandez, V. Tamma, F. Lecue, P. Cudré-Mauroux, J. Sequeda, C. Lange, J. Heflin. Ser.: Lecture Notes in Computer Science. V. 10588. Cham: Springer, 2017. P. 184–192. https://doi.org/10.1007/978-3-319-68204-4_19.
16. *Iana A., Jung S., Naeser P., Birukou A., Hertling S., Paulheim H.* Building a conference recommender system based on SciGraph and WikiCFP // SEMANTiCS 2019: Semantic Systems. The Power of AI and Knowledge Graphs / Ed. by M. Acosta, P. Cudré-Mauroux, M. Maleshkova, T. Pellegrini, H. Sack, Y. Sure-Vetter. Ser.: Lecture Notes in Computer Science. V. 11702. Cham: Springer, 2019. P. 117–123. https://doi.org/10.1007/978-3-030-33220-4_9.
17. *Frärber M.* The Microsoft Academic Knowledge Graph: A linked data source with 8 billion triples of scholarly data // ISWC 2019: The Semantic Web – ISWC 2019 / Ed. by C. Ghidini, O. Hartig, M. Maleshkova, V. Svátek, I. Cruz, A. Hogan, J. Song, M. Lefrançois, F. Gandon. Ser.: Lecture Notes in Computer Science. V. 11779. Cham: Springer, 2019. P. 113–129. https://doi.org/10.1007/978-3-030-30796-7_8.
18. *Nevzorova O., Zhiltsov N., Zaikin D., Zhibrik O., Kirillovich A., Nevzorov V., Birialtsev E.* Bringing math to LOD: A semantic publishing platform prototype for scientific collections in mathematics // ISWC 2013: The Semantic Web – ISWC 2013 / Ed. by H. Alani, L. Kagal, A. Fokoue, P. Groth, C. Biemann, J.X. Parreira, L. Aroyo, N. Noy, C. Welty, K. Janowicz. Ser.: Lecture Notes in Computer Science. V. 8218. Berlin, Heidelberg: Springer, 2013. P. 379–394. https://doi.org/10.1007/978-3-642-41335-3_24.
19. *Buchgeher G., Gabauer D., Martinez-Gil J., Ehrlinger L.* Knowledge graphs in manufacturing and production: A systematic literature review // IEEE Access. 2021. V. 9. P. 55537–55554. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2021.3070395>.
20. *Zhao Z., Han S.-K., So I.-M.* Architecture of knowledge graph construction techniques // Int. J. Pure Appl. Math. 2018. V. 118, No 19. P. 1869–1883.
21. *Kaufmann M., Wilke G., Portmann E., Hinkelmann K.* Combining bottom-up and top-down generation of interactive knowledge maps for enterprise search // KSEM 2014: Knowledge Science, Engineering and Management / Ed. by R. Buchmann, C.V. Kifor, J. Yu. Ser.: Lecture Notes in Computer Science. V. 8793. Cham: Springer, 2014. P. 186–197. https://doi.org/10.1007/978-3-319-12096-6_17.
22. *Fensel D., Şimşek U., Angele K., Huaman E., Kärle E., Panasiuk O., Toma I., Umbrich J., Wahler A.* Knowledge Graphs. Methodology, Tools and Selected Use Cases. Cham: Springer, 2020. xvi, 148 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-37439-6>.
23. *Schneider P., Schopf T., Vladika J., Galkin M., Simperl E., Matthes F.* A Decade of Knowledge Graphs in Natural Language Processing: A Survey. arXiv.2210.00105, 2022. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2210.00105>.
24. *Schneider P., Schopf T., Vladika J., Galkin M., Simperl E., Matthes F.* A decade of knowledge graphs in natural language processing: A survey // Proc. 2nd Conf. of the Asia-Pacific Chapter of the Association for Computational Linguistics and 12th Int. Joint Conf. on Natural Language Processing / Ed. by Y. He, H. Ji, S. Li, Y. Liu, C.-H. Chang. Assoc. Comput. Linguist., 2022. V. 1. P. 601–614.
25. *Pan S., Luo L., Wang Y., Chen C., Wang J., Wu X.* Unifying Large Language Models and Knowledge Graphs: A Roadmap. arXiv:2306.08302, 2023. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2306.08302>.
26. *Shen T., Zhang F., Cheng J.* A comprehensive overview of knowledge graph completion // Knowl.-Based Syst. 2022. V. 255. Art. 109597. <https://doi.org/10.1016/j.knosys.2022.109597>.

27. Zhu Y., Wang X., Chen J., Qiao S., Ou Y., Yao Y., Deng S., Chen H., Zhang N. LLMs for Knowledge Graph Construction and Reasoning: Recent Capabilities and Future Opportunities. arXiv:2305.13168, 2023. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2305.13168>.
28. Elizarov, A.M., Kirillovich, A.V., Lipachev, E.K., Nevzorova O.A. OntoMath^{PRO}: An ontology of mathematical knowledge // Dokl. Math. 2022. V. 106, No 3. P. 429–435. <https://doi.org/10.1134/S1064562422700016>.
29. Kirillovich A.V., Nevzorova O.A., Lipachev E.K. OntoMath^{PRO} 2.0 ontology: Updates of formal model // Lobachevskii J. Math. 2022. V. 43, No 12. P. 3504–3514. <https://doi.org/10.1134/S1995080222150136>.
30. Nevzorova O.A., Falileeva M.V., Kirillovich A.V., Lipachev E.K., Shakirova L.R., Dyupina A.E. OntoMath^{Edu} educational ontology: Problems of ontological engineering // Pattern Recognit. Image Anal. 2023. V. 33, No 3. P. 460–466. <https://doi.org/10.1134/S1054661823030367>.
31. Ataeva O.M., Serebryakov V.A., Tuchkova N.P. Ontological approach to a knowledge graph construction in a semantic library // Lobachevskii J. Math. 2023. V. 44, No 6. P. 2229–2239. <https://doi.org/10.1134/S1995080223060471>.
32. Wang J. Math-KG: Construction and Applications of Mathematical Knowledge Graph. arXiv:2205.03772, 2022. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2205.03772>.
33. Röder M., Both A., Hinneburg A. Exploring the space of topic coherence measures // Proc. 8th ACM Int. Conf. on Web Search and Data Mining (WSDM'15). New York, NY: Assoc. Comput. Mach., 2015. P. 399–408. <https://doi.org/10.1145/2684822.2685324>.
34. Blei D.M., Ng A.Y., Jordan M.I. Latent Dirichlet allocation // J. Mach. Learn. Res. 2003. V. 3. P. 993–1022.
35. Porteous I., Newman D., Ihler A., Asuncion A., Smyth P., Welling M. Fast collapsed Gibbs sampling for latent Dirichlet allocation // Proc. 14th ACM SIGKDD Int. Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD'08). New York, NY: Assoc. Comput. Mach., 2008. P. 569–577. <https://doi.org/10.1145/1401890.1401960>.

Поступила в редакцию 14.08.2023

Принята к публикации 14.09.2023

Невзорова Ольга Авенировна, кандидат технических наук, доцент кафедры информационных систем Казанского (Приволжского) федерального университета

Казанский (Приволжский) федеральный университет

ул. Кремлевская, д. 18, г. Казань, 420008, Россия

E-mail: onevzoro@gmail.com

Гизатуллин Булат Тимурович, магистрант кафедры математической статистики Института математики и механики им. Н.И. Лобачевского

Казанский (Приволжский) федеральный университет

ул. Кремлевская, д. 18, г. Казань, 420008, Россия

E-mail: gizat.blb@gmail.com

UCHENYE ZAPISKI KAZANSKOGO UNIVERSITETA.
SERIYA FIZIKO-MATEMATICHESKIE NAUKI
(Proceedings of Kazan University. Physics and Mathematics Series)
2023, vol. 165, no. 3, pp. 264–281

ORIGINAL ARTICLE

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.264-281

A System for Automatic Construction of Knowledge Graphs
of Mathematical Documents

A.O. Nevzorova*, B.T. Gizatullin**

Kazan Federal University, Kazan, 420008 Russia

E-mail: *onevzoro@gmail.com, **gizat.bl@gmail.com

Received August 14, 2023; Accepted September 14, 2023

Abstract

This article outlines the process of creating an automated system for knowledge graph construction from collections of mathematical documents in $\LaTeX$ format. The MathCollectionOntology, which defines the types of objects and relationships in knowledge graphs, was developed. The introduced toolkit includes methods for extracting mathematical terms, browsing and identifying document topics, extracting entities from $\LaTeX$ code, and calculating statistical parameters of the graph.

The parsed entities are mathematical terms, topics generated through the Latent Dirichlet Allocation, UDC codes, used formulas, author affiliations, cited literature, and others. The knowledge graph captures each extracted object using specific types of relationships defined in the MathCollectionOntology.

Here, a knowledge graph was coined for a collection of articles published in *Izvestiya VUZov. Matematika* journal (1114 Russian-language documents in $\LaTeX$ format). The thematic terms of the document topics were described. The quantitative parameters of the constructed knowledge graph were obtained.

Keywords: knowledge graph construction, linked open data, topic modeling, mathematical article, text processing

Acknowledgments. This study was supported by the Russian Science Foundation (project no. 21-11-00105).

Figure Captions

Fig. 1. Diagram of processing a collection of mathematical articles.

Fig. 2. System architecture and code structure. Rectangles with solid border are the core web services of the system. Solid arrows are the connections through HTTP APIs. Rectangles with dashed line are the key modules and classes. Dashed arrows are the internal software components used in the block from which the arrow stems. Rectangles with dotted border are the major external dependencies. Dotted lines show the implementation of components or services using external libraries (rdflib, nltk, owlready2, pymorphy2) and frameworks (Flask).

Fig. 3. Exploration of the number of topics with the step of 5 for LDA.

References

1. National Research Council. *Developing a 21st Century Global Library for Mathematics Research*. Washington, DC, Natl. Acad. Press, 2014. 142 p.
<https://doi.org/10.17226/18619>.
2. Ion P.D.F., Watt S.M. The Global Digital Mathematics Library and the International Mathematical Knowledge Trust. In: *CICM 2017: Intelligent Computer Mathematics*. Geuvers H., England M., Hasan O., Rabe F., Teschke O. (Eds.). Ser.: Lecture Notes in Computer Science. Vol. 10383. Cham, Springer, 2017, pp. 56–69.
https://doi.org/10.1007/978-3-319-62075-6_5.
3. Bouche T., Rákosnik J. Report on the EuDML External Cooperation Model. *Proc. Joint Math. Meet. AMS Special Session*. San Diego, 2013, pp. 99–108. URL: https://www.emis.de/proceedings/TIEP2013/07bouche_rakosnik.pdf.
4. Carette J., Farmer W.M., Kohlhase M., Rabe F. Big math and the one-brain barrier: The tetrapod model of mathematical knowledge. *Math. Intell.*, 2021, vol. 43, pp. 78–87.
<https://doi.org/10.1007/s00283-020-10006-0>.
5. Borwein J., Rocha E.M., Rodrigues J.F. (Eds.) *Communicating Mathematics in the Digital Era*. Wellesley, MA, A K Peters, CRC Press, 2008. 325 p. <https://doi.org/10.1201/b10587>.
6. Bouche T. Digital mathematics libraries: The good, the bad, the ugly. *Math. Comput. Sci.*, 2010, vol. 3, pp. 227–241. <https://doi.org/10.1007/s11786-010-0029-2>.
7. Elizarov A.M., Lipachev E.K., Zuev D.S. Digital mathematical libraries: Overview of implementations and content management services. *CEUR Workshop Proc.*, 2017, vol. 2022, pp. 317–325. URL: <https://ceur-ws.org/Vol-2022/paper49.pdf>.
8. Hogan A., Gutierrez C., Cochez M., de Melo G., Kirrane S., Polleres A., Navigli R., Ngomo A.-C. N., Rashid S. M., Schmelzeisen L., Staab S., Blomqvist E., d'Amato C., Labra Gayo J. E., Neumaier S., Rula A., Sequeda J., Zimmermann A. *Knowledge Graphs*. Ser.: Synthesis Lectures on Data, Semantics, and Knowledge. Cham, Springer, 2022. xix, 237 p. <https://doi.org/10.2200/S01125ED1V01Y202109DSK022>.
9. Lehmann J., Isele R., Jakob M., Jentzsch A., Kontokostas D., Mendes P. N., Hellmann S., Morsey M., Kleef P. V., Auer S., Bizer C. DBpedia – A large-scale, multilingual knowledge base extracted from Wikipedia. *Semantic Web*, 2015, vol. 6, no. 2, pp. 167–195.
<https://doi.org/10.3233/SW-140134>.
10. Bollacker K., Cook R., Tufts P. Freebase: A shared database of structured general human knowledge. *Proc. 22nd Natl. Conf. on Artificial Intelligence*. Vol. 2. Vancouver, AAAI Press, 2007, pp. 1962–1963.
11. Vrandečić D., Krötzsch M. Wikidata: A free collaborative knowledge base. *Commun. ACM*, 2014, vol. 57, no. 10, pp. 78–85. <https://doi.org/10.1145/2629489>.
12. Hoffart J., Suchanek F.M., Berberich K., Lewis-Kelham E., de Melo G., Weikum G. YAGO2: Exploring and querying world knowledge in time, space, context, and many languages. *Proc. 20th Int. World Wide Web Conf.* Hyderabad, 2011, pp. 229–232.
<https://doi.org/10.1145/1963192.1963296>.
13. Carlson A., Betteridge J., Wang R.C., Hruschka E.R., Mitchell T.M. Coupled semi-supervised learning for information extraction. *Proc. 3rd ACM Int. Conf. on Web Search and Data Mining*. New York, NY, Assoc. Comput. Mach., 2010, pp. 101–110.
<https://doi.org/10.1145/1718487.1718501>.
14. Noy N., Gao Y., Jain A., Narayanan A., Patterson A., Taylor J. Industry-scale knowledge graphs: Lessons and challenges. *Commun. ACM*, 2019, vol. 62, no. 8, pp. 36–43.
<https://doi.org/10.1145/3331166>.

15. Peroni S., Shotton D.M., Vitali F. One year of the OpenCitations Corpus: Releasing RDF-based scholarly citation data into the public domain. In: *ISWC 2017: The Semantic Web – ISWC 2017*. d’Amato C., Fernandez M., Tamma V., Lecue F., Cudré-Mauroux P., Sequeda J., Lange C., Heflin J. (Eds.). Ser.: Lecture Notes in Computer Science. Vol. 10588. Cham, Springer, 2017, pp. 184–192. https://doi.org/10.1007/978-3-319-68204-4_19.
16. Iana A., Jung S., Naeser P., Birukou A., Hertling S., Paulheim H. Building a conference recommender system based on SciGraph and WikiCFP. In: *SEMANTiCS 2019: Semantic Systems. The Power of AI and Knowledge Graphs*. Acosta M., Cudré-Mauroux P., Maleshkova M., Pellegrini T., Sack H., Sure-Vetter Y. (Eds.). Ser.: Lecture Notes in Computer Science. Vol. 11702. Cham, Springer, 2019, pp. 117–123. https://doi.org/10.1007/978-3-030-33220-4_9.
17. Frärber M. The Microsoft Academic Knowledge Graph: A linked data source with 8 billion triples of scholarly data. In: *ISWC 2019: The Semantic Web – ISWC 2019*. Ghidini C., Hartig O., Maleshkova M., Svátek V., Cruz I., Hogan A., Song J., Lefrançois M., Gandon F. (Eds.). Ser.: Lecture Notes in Computer Science. Vol. 11779. Cham, Springer, 2019, pp. 113–129. https://doi.org/10.1007/978-3-030-30796-7_8.
18. Nevzorova O., Zhiltsov N., Zaikin D., Zhibrik O., Kirillovich A., Nevzorov V., Birialtsev E. Bringing math to LOD: A semantic publishing platform prototype for scientific collections in mathematics. In: *ISWC 2013: The Semantic Web – ISWC 2013*. Alani H., Kagal L., Fokoue A., Groth P., Biemann C., Parreira J.X., Aroyo L., Noy N., Welty C., Janowicz K. (Eds.). Ser.: Lecture Notes in Computer Science. Vol. 8218. Berlin, Heidelberg, Springer, 2013, pp. 379–394. https://doi.org/10.1007/978-3-642-41335-3_24.
19. Buchgeher G., Gabauer D., Martinez-Gil J., Ehrlinger L. Knowledge graphs in manufacturing and production: A systematic literature review. *IEEE Access*, 2021, vol. 9, pp. 55537–55554. <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2021.3070395>.
20. Zhao Z., Han S.-K., So I.-M. Architecture of knowledge graph construction techniques. *Int. J. Pure Appl. Math.*, 2018, vol. 118, no. 19, pp. 1869–1883.
21. Kaufmann M., Wilke G., Portmann E., Hinkelmann K. Combining bottom-up and top-down generation of interactive knowledge maps for enterprise search. In: *KSEM 2014: Knowledge Science, Engineering and Management*. Buchmann R., Kifor C.V., Yu J. (Eds.). Ser.: Lecture Notes in Computer Science. Vol. 8793. Cham, Springer, 2014, pp. 186–197. https://doi.org/10.1007/978-3-319-12096-6_17.
22. Fensel D., Şimşek U., Angele K., Huaman E., Kärle E., Panasiuk O., Toma I., Umbrich J., Wahler A. *Knowledge Graphs. Methodology, Tools and Selected Use Cases*. Cham, Springer, 2020. xvi, 148 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-030-37439-6>.
23. Schneider P., Schopf T., Vladika J., Galkin M., Simperl E., Matthes F. A Decade of Knowledge Graphs in Natural Language Processing: A Survey. arXiv.2210.00105, 2022. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2210.00105>.
24. Schneider P., Schopf T., Vladika J., Galkin M., Simperl E., Matthes F. A decade of knowledge graphs in natural language processing: A survey. *Proc. 2nd Conf. of the Asia-Pacific Chapter of the Association for Computational Linguistics and 12th Int. Joint Conf. on Natural Language Processing*. Vol. 1. He Y., Ji H., Li S., Liu Y., Chang C.-H. (Eds.). Assoc. Comput. Linguist., 2022, pp. 601–614.
25. Pan S., Luo L., Wang Y., Chen C., Wang J., Wu X. Unifying Large Language Models and Knowledge Graphs: A Roadmap. arXiv:2306.08302, 2023. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2306.08302>.

26. Shen T., Zhang F., Cheng J. A comprehensive overview of knowledge graph completion. *Knowl.-Based Syst.*, 2022, vol. 255, art. 109597. <https://doi.org/10.1016/j.knosys.2022.109597>.
27. Zhu Y., Wang X., Chen J., Qiao S., Ou Y., Yao Y., Deng S., Chen H., Zhang N. LLMs for Knowledge Graph Construction and Reasoning: Recent Capabilities and Future Opportunities. arXiv:2305.13168, 2023. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2305.13168>.
28. Elizarov, A.M., Kirillovich, A.V., Lipachev, E.K., Nevzorova O.A. OntoMath^{PRO}: An ontology of mathematical knowledge. *Dokl. Math.*, 2022, vol. 106, no. 3, pp. 429–435. <https://doi.org/10.1134/S1064562422700016>.
29. Kirillovich A.V., Nevzorova O.A., Lipachev E.K. OntoMath^{PRO} 2.0 ontology: Updates of formal model. *Lobachevskii J. Math.*, 2022, vol. 43, no. 12, pp. 3504–3514. <https://doi.org/10.1134/S1995080222150136>.
30. Nevzorova O.A., Falileeva M.V., Kirillovich A.V., Lipachev E.K., Shakirova L.R., Dyupina A.E. OntoMath^{Edu} educational ontology: Problems of ontological engineering. *Pattern Recognit. Image Anal.*, 2023, vol. 33, no. 3, pp. 460–466. <https://doi.org/10.1134/S1054661823030367>.
31. Ataeva O.M., Serebryakov V.A., Tuchkova N.P. Ontological approach to a knowledge graph construction in a semantic library. *Lobachevskii J. Math.*, 2023, vol. 44, no. 6, pp. 2229–2239. <https://doi.org/10.1134/S1995080223060471>.
32. Wang J. Math-KG: Construction and Applications of Mathematical Knowledge Graph. arXiv:2205.03772, 2022. <https://doi.org/10.48550/arXiv.2205.03772>.
33. Röder M., Both A., Hinneburg A. Exploring the space of topic coherence measures. *Proc. 8th ACM Int. Conf. on Web Search and Data Mining (WSDM'15)*. New York, NY, Assoc. Comput. Mach., 2015, pp. 399–408. <https://doi.org/10.1145/2684822.2685324>.
34. Blei D.M., Ng A.Y., Jordan M.I. Latent Dirichlet allocation. *J. Mach. Learn. Res.*, 2003, vol. 3, pp. 993–1022.
35. Porteous I., Newman D., Ihler A., Asuncion A., Smyth P., Welling M. Fast collapsed Gibbs sampling for latent Dirichlet allocation. *Proc. 14th ACM SIGKDD Int. Conf. on Knowledge Discovery and Data Mining (KDD'08)*. New York, NY, Assoc. Comput. Mach., 2008, pp. 569–577. <https://doi.org/10.1145/1401890.1401960>.

⟨ **Для цитирования:** Невзорова А.О., Гизатуллин Б.Т. Система автоматического построения графов знаний математических документов // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. 2023. Т. 165, кн. 3. С. 264–281. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.264-281>. ⟩

⟨ **For citation:** Nevzorova A.O., Gizatullin B.T. A system for automatic construction of knowledge graphs of mathematical documents. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2023, vol. 165, no. 3, pp. 264–281. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.264-281>. (In Russian) ⟩

ОРИГИНАЛЬНАЯ СТАТЬЯ

УДК 519.168

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.282-293

МАРШРУТИЗАЦИЯ В ЦИРКУЛЯНТНЫХ ГРАФАХ НА ОСНОВЕ ВИРТУАЛЬНОЙ КООРДИНАТНОЙ СИСТЕМЫ

А. М. Сухов¹, А. Ю. Романов², Е. В. Глушак³

¹*Севастопольский государственный университет, г. Севастополь, 299053, Россия*

²*Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»,
г. Москва, 101000, Россия*

³*Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики,
г. Самара, 443010, Россия*

Аннотация

Рассмотрены методы маршрутизации в двумерных циркулянтных графах (каждая вершина соединена с четырьмя соседними). Уникальная группа симметрий циркулянта позволяет использовать его в качестве топологии для вычислительных устройств большой мощности, в том числе сетей на кристалле и суперкомпьютеров кластерного типа. Показано, что в качестве координат вершин можно использовать минимальное число переходов по образующим от начальной вершины. Разработаны два метода маршрутизации на основе координат. Первый предполагает восстановление номеров вершин и нахождение разности между ними, координаты соответствующей вершины задают маршрут. Второй метод состоит в нахождении разности координат конечной и начальной вершин и минимизации маршрута на основе предложенного алгоритма.

Ключевые слова: циркулянтный граф, сеть на кристалле, суперкомпьютерный кластер, маршрутизация на основе виртуальной координатной системы

Введение

Развитие новых информационных технологий требует постоянного увеличения вычислительных мощностей. Такие технологии, как искусственный интеллект, представленный чат-ботами, новые облачные медицинские технологии и т. д., могут запускаться только на суперкомпьютерах с высокими характеристиками [1]. В то же время увеличение производительности вычислительных систем больше не базируется на повышении тактовой частоты процессора – основным способом ее увеличения является взаимодействие большого количества вычислительных элементов в рамках чипа или кластерной системы суперкомпьютера [2].

Чтобы отдельные вычислительные элементы функционировали как единое целое, требуется соединить их коммуникационной сетью. Области использования подобных сетей включают сети на кристалле (СтнК) [3], сети суперкомпьютеров (вычислительные кластеры) [4] и другие высокопроизводительные вычислительные устройства для обеспечения быстрого и эффективного взаимодействия между элементами системы. К этой сети предъявляются высокие требования, в частности,

такие как минимальная сетевая задержка между вычислительными элементами и максимальная пропускная способность [5].

Топология вычислительной сети представляет собой граф со специальными свойствами, которые перечислены далее. Такой граф должен включать максимальное количество вершин и иметь минимальное расстояние между узлами [6]. Под расстоянием между вершинами понимается минимальное количество переходов по графу. Максимальное расстояние между любыми двумя вершинами графа называется его диаметром [7]. Для рассматриваемых нами графов диаметр всегда ограничен. Поискам графов с подобными свойствами уделяется достаточно большое внимание [8], [9].

Каждый из узлов исследуемого семейства графов должен быть связан с фиксированным количеством соседей. В статье предполагается, что это количество равно четырем. В стандартной топологии mesh это требование не выполняется, поскольку есть граничные узлы, которые имеют трех и даже двух соседей. Это приводит к значительному ухудшению связности сети и снижению надежности подсистемы связи [10]. Таким образом, от сети требуется, чтобы все ее узлы были равнозначными и могли быть использованы для передачи данных. Это техническое требование может быть переформулировано как математическое. Оно означает, что искомым граф должен быть инвариантен относительно преобразования, переводящего произвольную вершину графа в любую другую. Это большая группа симметрий, но она сильно ограничивает возможные варианты топологий графа. Одной из возможных топологий, которая удовлетворяет всем названным требованиям, является двумерный циркулянт [11]. Подход, представленный в настоящем исследовании, можно легко обобщить и на циркулянтные графы большей размерности.

В работе представлен новый метод маршрутизации (поиска кратчайшего пути) на циркулянтном графе, который основан на использовании виртуальной координатной системы. Во втором разделе статьи описан процесс присвоения координат вершинам циркулянтного графа. В третьем разделе исследован процесс построения маршрута между произвольными узлами циркулянта, который опирается на координаты этих узлов. В четвертом разделе проведено моделирование отказов и их влияния на работоспособность вычислительного устройства.

1. Задание координат

Рассмотрим способы задания координат для циркулянтного графа. Для наглядности возьмем циркулянтный граф $C(25; 1, 7)$, который изображен на рис. 1. На основе этого графа сформулируем основные положения в аналитическом виде.

В рассматриваемом циркулянте имеется 25 узлов. Каждый из них связан с четырьмя соседними, длина меньшей образующей равна единице, а большей – 7. Циркулянт – это один из представителей кольцевой топологии, в которой все узлы соединены последовательно. Нулевой узел является соседним с последним узлом. Также у каждого узла есть регулярные соединения со сдвигом на несколько узлов по часовой и против часовой стрелки.

Ниже рассмотрены графы с циркулянтной топологией типа $C(N; s_1, s_n)$ с произвольным количеством образующих. Эти графы представляют собой частный случай кольцевых графов [6, 7]. Общее количество узлов циркулянта принято равным N , длины циклических сдвигов (образующих) обозначены как s_i . Можно предположить без ограничения общности, что номера образующих s_i размечены в порядке возрастания их длин. Отметим, что длины всех образующих должны быть взаимно простыми числами.

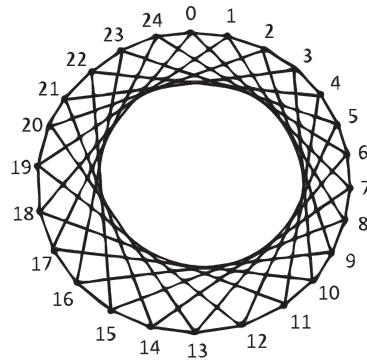
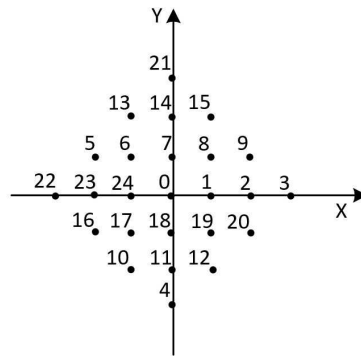
Рис. 1. Циркулянт $C(25; 1, 7)$ 

Рис. 2. Распределение узлов циркулянта по окрестностям

Узлы циркулянта обозначим заглавными полужирными латинскими буквами. Один из узлов назначается начальным с номером **0**. Узлы нумеруются, начиная с нуля, так что каждому узлу в рассматриваемом графе присваивается номер от **0** до **24**. Основная задача данного раздела статьи состоит в построении системы координат, а также определении порядка присвоения координат для каждого узла циркулянта.

Распределим все узлы циркулянта по окрестностям относительно начальной точки. Это распределение представлено на рис. 2.

В положительном направлении оси X размещены узлы циркулянта, соседствующие с текущим и отстоящие от него на длину малой образующей со сдвигом по часовой стрелке. При сдвиге против часовой стрелки номер узла уменьшается на единицу. Сдвиг по оси Y соответствует перемещению вдоль большей образующей.

Из рис. 2 следует, что любой узел циркулянта может быть достигнут от начальной точки не более, чем за три перехода. Учитывая симметрию циркулянта, позволяющую переводить произвольный узел в любой другой, можно сделать вывод, что максимальное расстояние между узлами или диаметр циркулянта d равен 3. Заметим также, что все ячейки ромба на рис. 2 заполнены узлами, и вакантных мест нет. Такой циркулянт называется плотным [6, 7].

Ранее было установлено [12], что существует целое семейство плотных циркулянтов вида $C(2n(n+1)+1; 1, 2n+1)$. Рассматриваемый нами циркулянтный

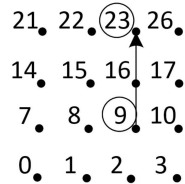


Рис. 3. Расширение зоны координат

граф является представителем этого семейства. Заметим, что переменная n определяет максимальное количество окрестностей графа, то есть совпадает с диаметром: $n = d$.

Теперь достаточно легко решить вопрос о координатах узлов. В соответствии с рис. 2 в качестве координат можно взять количество сдвигов по осям X и Y относительно начала координат (узла с номером **0**). Так, например, узел **9** будет иметь координаты (2,1). В общем случае, если узел **A** имеет координаты (x_A, y_A) , то его номер можно восстановить по формуле

$$\mathbf{A}(x_A, y_A) = x_A s_1 + y_A s_2. \quad (1)$$

На первый взгляд, такая система координат полностью идентична декартовой, но имеется существенное различие: при выходе за пределы ромба на рис. 2 новых узлов не должно появляться, а все узлы должны повторяться с некоторой периодичностью. Так, начальный узел (начало координат) при повторном появлении получит координаты (x_0^i, y_0^i) : $(4, 3)(7, -1), (-7, 1)(-4, -3)$.

Таким образом, нами задана координатная система, определяющая начальный узел и координаты произвольного узла, использующие число поворотов по и против часовой стрелки для большой и малой образующих.

2. Правила маршрутизации

В предыдущем разделе предложен метод присвоения координат узлам сети. Теперь для заданной системы координат требуется разработать метод нахождения кратчайших путей между двумя произвольными узлами, причем те правила маршрутизации, что применяются в декартовых координатах, в ряде случаев не дают оптимального результата. Например, если использовать правила декартовой системы координат для построения маршрута между узлами **9** (2,1) и **23** (-2,0), то в результате вычитания получим вектор $(-4, -1)$. Начало маршрута находится в узле **9**, маршрут между узлами состоит из 5 хопов (переходов), в то время как диаметр циркулянта $C(25; 1, 7)$ равен 3. Следовательно, существует более короткий маршрут, а правило построения маршрутов должно быть модернизировано.

На рис. 3 приведено размещение узлов циркулянта вне первоначального ромба. Здесь узел **23** имеет координаты (2,3), а вектор, характеризующий искомый маршрут, задается как (0,2). Это означает, что между узлами **9** и **23** существует переход в 2 хопа по большой образующей в направлении по часовой стрелке, то есть узлы **9** и **23** расположены на расстоянии, равном двум.

Проведенный анализ позволяет построить маршрут двумя способами, используя только координаты узлов. Первый способ основан на том факте, что вектор, соединяющий узлы **0** и **14**, совпадает с вектором, соединяющим узлы **9** и **23**. Поэтому сначала следует восстановить по координатам номера узлов **A** и **B**, см. формулу (1). Затем нужно найти разность $\mathbf{D} = \mathbf{B} - \mathbf{A}$ между номерами конечного и начального узлов. После этого с помощью рис. 2 нужно установить

координаты узла $\mathbf{D}$, которые и содержат ответ о пути между узлами. Если номера узлов в ходе описанной процедуры примут отрицательные значения, то знак у координат следует изменить на противоположный. Предложенный способ сложно реализовать на реальном вычислительном устройстве, поскольку он содержит множественные обращения к разным узлам циркулянта, что замедлит построение маршрута.

Второй метод маршрутизации опирается только на локальную информацию от начального и конечного узлов $\mathbf{A}$ и $\mathbf{B}$. На первом шаге алгоритма требуется найти координаты вектора $\mathbf{D}$ как разности

$$\mathbf{D} = \mathbf{B} - \mathbf{A} = (x_B - x_A, y_B - y_A).$$

Если сумма модулей координат не превосходит диаметр d циркулянта, то полученный маршрут является оптимальным. Если же длина вектора $\mathbf{D}$ больше диаметра циркулянта, то требуются дальнейшие действия. В предыдущем разделе было отмечено, что начальный узел $\mathbf{0}$ повторяется на координатной плоскости, поэтому к полученному вектору нужно добавить все ближайшие четыре узла (x_0^i, y_0^i) . В итоге для узлов $\mathbf{9}$ и $\mathbf{23}$ получим такой результат вычислений: $(-4, -1) + (4, 3) = (0, 2)$, то есть учет первого переходного вектора приводит к правильному результату. Длина всех остальных полученных векторов будет больше диаметра d циркулянта. Значит, итоговый ответ можно записать в виде

$$\mathbf{D} = \mathbf{B}(x_B, y_B) - \mathbf{A}(x_A, y_A) + (x_0^i, y_0^i),$$

где $|x_D| + |y_D| \leq d$, $i \in \overline{0, 4}$; при $i = 0$ имеем $x_0^0 = 0$, $y_0^0 = 0$.

Таким образом, сформулированы правила построения маршрутов при помощи виртуальной координатной системы.

3. Моделирование отказов сети из-за перегрузок

При оценке любых алгоритмов маршрутизации следует обращать внимание на их устойчивость при кратковременных отключениях некоторых узлов. Неработоспособность ряда узлов вызывается целым рядом причин, в том числе их перегрузкой, перегрузкой сетевых соединений, сбоями системы управления и т. д. [13–15]. Тем не менее неработоспособность отдельных узлов не должна приводить к выходу из строя всей сети целиком [16]. Если СтнК настроена с учетом отказов, то маршруты перестраиваются и проходят в обход отключенных узлов. В этом случае могут наблюдаться снижение производительности системы, но не полный ее отказ [17].

Проведем анализ отказоустойчивости для предложенного метода маршрутизации. Маршрут между двумя узлами может включать переходы по большой и малой образующим. Каждый маршрут фиксирует только количество таких переходов, но не последовательность их выполнения. Если сначала выполнить переход по большей образующей, а затем по меньшей, то результат совпадет с результатом переходов в обратном порядке. Значит, конечный узел маршрута останется тем же самым.

В общем случае, если маршрут состоит из L участков, из которых M переходов выполнены по малой образующей, то общее количество несовпадающих маршрутов равно числу сочетаний C_L^M . Переход по любому из этих маршрутов приводит к одинаковому результату, поэтому при построении маршрута лучше выбирать следующий участок случайным образом с учетом общего количества переходов. Если следующий узел маршрута неработоспособен, то можно выполнить переход по альтернативной образующей. Следовательно, представленный способ маршрутизации является устойчивым к появлению неработоспособных узлов.

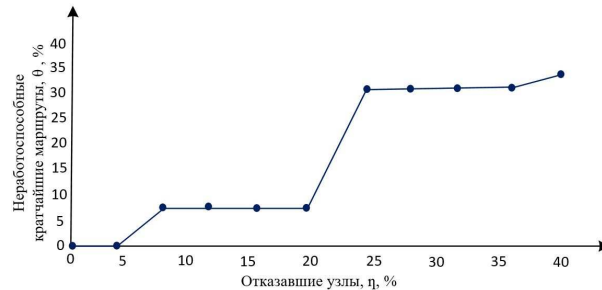


Рис. 4. Доля отказов на кратчайших маршрутах

В случае, если дальнейший маршрут предусматривает переходы по одной и той же образующей, а следующий узел неработоспособен, можно сделать переход по другой образующей, а затем продолжить маршрут обычным способом и вернуться обратно, сделав переход по альтернативной образующей в обратном направлении. Такой алгоритм удлиняет маршрут на два перехода, но при этом повышает устойчивость обмена данными.

Проведем моделирование предложенного подхода. Случайным образом выберем 10 маршрутов (по 10 начальных и конечных точек маршрута). Затем построим маршруты между этими парами узлов, как описано в разделе 3. Если хотя бы одна из координат вектора, описывающего маршрут, равна 0, то такой маршрут является безальтернативным. Если обе координаты отличны от 0, то существует несколько путей между узлами – такая маршрутизация более устойчива.

Далее запишем все возможные маршруты для всех пар точек с учетом альтернативных переходов и определим общее количество участков во всех маршрутах. Под участком понимаем переход между соседними узлами маршрута. В результате этих действий получим исходный набор данных для моделирования.

Следующим шагом назначаются отказавшие узлы, каждый из них выбирается случайным образом. Последовательно, шаг за шагом число отказавших узлов доводится до 10. Выход из строя каждого узла из 25 означает, что доля отказавших узлов увеличивается на 4%.

Анализ исходных данных в процессе увеличения доли отказавших узлов позволяет установить, сколько кратчайших маршрутов стали неработоспособными. Для восстановления работоспособности каждого такого маршрута общая его длина увеличивается на два участка за счет процесса обхода отказавшего узла по альтернативной образующей.

На рис. 4 представлен график, на котором изображена зависимость числа неработоспособных кратчайших маршрутов от процента отказавших узлов. По оси X отложена в процентах доля η отказавших узлов, доля θ неработоспособных кратчайших маршрутов нанесена на ось Y .

На рис. 5 приведено относительное увеличение суммарной длины маршрутов в зависимости от количества отказавших узлов. На оси X отмечен процент отказавших узлов, а относительное увеличение ϑ суммарной длины маршрутов обозначено на оси Y .

Отметим, что небольшое количество отказавших узлов (до 5%) не оказывает влияния на производительность СтнК, подсистема которой построена на основе циркулянтной топологии. За счет возможностей обхода отказавших узлов отказы на кратчайших маршрутах появляются не сразу, а лишь после преодоления порогового значения. Дальнейший рост доли отказавших узлов сопровождается ростом количества неработоспособных кратчайших маршрутов. При этом за счет

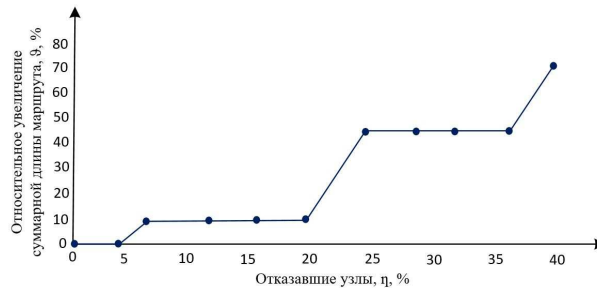


Рис. 5. Относительное увеличение суммарной длины маршрутов

обхода отказавших узлов работоспособность сети сохраняется, но возрастает длина маршрутов, как это показано на рис. 5. Производительность вычислительного устройства уменьшается незначительно. Экспериментальная апробация на суперкомпьютере Севастопольского государственного университета (Афалина) показала, что при сокращении сетевой задержки на три порядка производительность увеличивается на 20% [18].

Следует также отметить, что даже при 40% отказавших узлов остается возможность построения маршрутов между любой парой узлов. Этот факт подчеркивает устойчивость предложенного метода маршрутизации на основе виртуальных координат. Значительный вклад в повышение устойчивости вносит кольцевая топология сети и отсутствие граничных узлов.

Еще одно преимущество предлагаемого подхода состоит в том, что координаты вычислительных элементов можно присвоить заранее на этапе производства, что хорошо подходит для СтнК, топология соединений вычислительных элементов которой должна быть зафиксирована и не может быть изменена в дальнейшем [19]. Для суперкомпьютеров кластерного типа присвоение координат можно проводить после фиксации сетевого соединения. После изменения сетевой конфигурации потребуется запускать процесс присвоения координат заново.

4. Выводы и дальнейшие исследования

Таким образом, исследована проблема построения эффективной топологии для многоядерных систем, таких как СтнК и вычислительные кластеры. Показано, что граф топологии подсистемы связи должен удовлетворять требованию симметрии относительно любого преобразования, переводящего произвольные вершины друг в друга. Установлено, что циркулянтные графы соответствуют этому требованию, и на примере двумерных циркулянтов разработана виртуальная координатная система. Для нее предложены два метода маршрутизации, которые имеют достаточную вычислительную сложность и устойчивость к ошибкам сети, что подтверждено с помощью моделирования и апробации на реальном вычислительном кластере. Предложенный подход может быть распространен на другие семейства циркулянтных графов (с тремя образующими и больше). Дальнейшим направлением развития исследований является разработка новых методов распараллеливания с учетом виртуальных координат и задержек на маршрутах [20], которые наблюдаются при обмене данными между вычислительными элементами.

Благодарности. Исследование выполнено за счет средств гранта РНФ (проект № 22-29-00979).

Литература

1. Kahle J.A., Moreno J., Dreps D. 2.1 Summit and Sierra: Designing AI/HPC supercomputers // 2019 IEEE Int. Solid-State Circuits Conf. – (ISSCC). IEEE. 2019. P. 42–43. <https://doi.org/10.1109/ISSCC.2019.8662426>.
2. Jain A., Dwivedi R.K., Alshazly H., Kumar A., Bourouis S., Kaur M. Design and simulation of ring network-on-chip for different configured nodes // Comput., Mater. Continua. 2022. V. 71, No 2. P. 4085–4100. <https://doi.org/10.32604/cmc.2022.023017>.
3. Bjerregaard T., Mahadevan S. A survey of research and practices of network-on-chip // ACM Comput. Surv. 2006. V. 38, No 1. P. 1–51. <https://doi.org/10.1145/1132952.1132953>.
4. Deng Y., Guo M., Ramos A.F., Huang X., Xu Z., Liu W. Optimal low-latency network topologies for cluster performance enhancement // J. Supercomput. 2020. V. 76, No 12. P. 9558–9584. <https://doi.org/10.1007/s11227-020-03216-y>.
5. Huang X., F. Ramos A., Deng Y. Optimal circulant graphs as low-latency network topologies // J. Supercomput. 2022. V. 78, No 11. P. 13491–13510. <https://doi.org/10.1007/s11227-022-04396-5>.
6. Belov A.V., Los A.B., Rozhkov M.I. Some classes of the MDS matrices over a finite field // Lobachevskii J. Math. 2017. V. 38, No 5. P. 880–883. <https://doi.org/10.1134/S1995080217050067>.
7. Monakhova E.A. A survey on undirected circulant graphs // Discrete Math., Algorithms Appl. 2012. V. 4, No 1. Art. 1250002. <https://doi.org/10.1142/S1793830912500024>.
8. Абросимов М.Б., Лось И.В., Костин С.В. Прimitивные однородные графы с экспонентом 2 и числом вершин до 16 // Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер. Матем. Механ. Информатика. 2021. Т. 21, № 2. С. 238–245.
9. El-Mesady A., Hamed Y.S., Shabana H. On the decomposition of circulant graphs using algorithmic approaches // Alexandria Eng. J. 2022. V. 61, No 10. P. 8263–8275. <https://doi.org/10.1016/j.aej.2022.01.049>.
10. Romanov A., Myachin N., Sukhov A. Fault-tolerant routing in networks-on-chip using self-organizing routing algorithms // IECON 2021 – 47th Annu. Conf. of the IEEE Industrial Electronics Society. IEEE. 2021. P. 1–6. <https://doi.org/10.1109/IECON48115.2021.9589829>.
11. Monakhova E.A., Monakhov O.G., Romanov A.Y. Routing algorithms in optimal degree four circulant networks based on relative addressing: Comparative analysis for networks-on-chip // IEEE Trans. Network Sci. Eng. 2022. V. 10, No 1. P. 413–425. <https://doi.org/10.1109/TNSE.2022.3211985>.
12. Sukhov A.M., Romanov A.Y. Serendipity: When research in one area leads to a positive result in another: [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://cacm.acm.org/blogs/blog-cacm/270457-serendipity-when-research-in-one-area-leads-to-a-positive-result-in-another/fulltext>, свободный. Проверено 17.10.2023.
13. Das S., Karfa C., Biswas S. Formal modeling of network-on-chip using CFSM and its application in detecting deadlock // IEEE Trans. Very Large Scale Integr. (VLSI) Syst. 2020. V. 28, No 4. P. 1016–1029. <https://doi.org/10.1109/TVLSI.2019.2959618>.
14. Montanana J.M., de Andres D., Tirado F. Fault tolerance on NoCs // 2013 27th Int. Conf. on Advanced Information Networking and Applications Workshops. IEEE. 2013. P. 138–143. <https://doi.org/10.1109/WAINA.2013.221>.
15. Gabis A.B., Koudil M. NoC routing protocols – objective-based classification // J. Syst. Archit. 2016. V. 66–67. P. 14–32. <https://doi.org/10.1016/j.sysarc.2016.04.011>.

16. *Radetzki M., Feng Ch., Zhao X., Jantsch A.* Methods for fault tolerance in networks-on-chip // ACM Comput. Surv. 2013. V. 46, No 1. P. 1–38.
<https://doi.org/10.1145/2522968.2522976>.
17. *Nadeem M.F., Imran M., Afzal Siddiqui H.M., Azeem M.* Fault tolerance designs of interconnection networks // Peer-to-Peer Networking Appl. 2023. V. 16, No 2. P. 1125–1134. <https://doi.org/10.1007/s12083-023-01462-4>.
18. *Demin A., Shakhov O., Sukhov A.* Coaxing performance from the complexity of HPC: [Электронный ресурс]. Режим доступа: <https://cacm.acm.org/blogs/blog-cacm/275134-coaxing-performance-from-the-complexity-of-hpc/fulltext>, свободный. – Проверено 17.10.2023.
19. *Jerger N.D.E., Krishna T., Peh L.-S.* On-Chip Networks. Ser.: Synthesis Lectures on Computer Architecture / Ed. by M. Martonosi. Morgan & Claypool, 2017. 190 p. <https://doi.org/10.2200/S00772ED1V01Y201704CAC040>.
20. *Dai Y., Zhang Y.* Adaptive digital twin for vehicular edge computing and networks // J. Commun. Inf. Networks. 2022. V. 7, No 1. P. 48–59.
<https://doi.org/10.23919/JCIN.2022.9745481>.

Поступила в редакцию 13.07.2023

Принята к публикации 24.08.2023

Сухов Андрей Михайлович, д. т. н., к. ф.-м. н., ведущий научный сотрудник Научно-исследовательской лаборатории прикладной математики и суперкомпьютерных вычислений Севастопольского государственного университета

Севастопольский государственный университет

ул. Университетская, д. 33, г. Севастополь, 299053, Россия

E-mail: sukhov@ssau.ru

Романов Александр Юрьевич, к. т. н., доцент, ведущий научный сотрудник Департамента компьютерной инженерии Национального исследовательского университета «Высшая школа экономики»

Национальный исследовательский университет «Высшая школа экономики»

ул. Мясницкая, д. 20, г. Москва, 101000, Россия

E-mail: a.romanov@hse.ru

Глушак Елена Владимировна, к. т. н., доцент кафедры сетей и систем связи Поволжского государственного университета телекоммуникаций и информатики

Поволжский государственный университет телекоммуникаций и информатики

ул. Льва Толстого, д. 23, г. Самара, 443010, Россия

E-mail: evglushak@yandex.ru

ISSN 2541–7746 (Print)
ISSN 2500–2198 (Online)

UCHENYE ZAPISKI KAZANSKOGO UNIVERSITETA.
SERIYA FIZIKO-MATEMATICHESKIE NAUKI
(Proceedings of Kazan University. Physics and Mathematics Series)
2023, vol. 165, no. 3, pp. 282–293

ORIGINAL ARTICLE

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.282-293

Routing in Circulant Graphs Based on a Virtual Coordinate System

A.M. Sukhov^{a*}, A.Y. Romanov^{b**}, E.V. Glushak^{c***}^aSevastopol State University, Sevastopol, 299053 Russia^bHSE University, Moscow, 101000 Russia^cPovolzhskiy State University of Telecommunications and Informatics, Samara, 443010 Russia

E-mail: *sukhov@ssau.ru, **a.romanov@hse.ru, ***evglushak@yandex.ru

Received July 13, 2023; Accepted August 24, 2023

Abstract

This article explores routing methods in two-dimensional circulant graphs where each vertex is linked to four neighboring ones. The unique symmetries of the circulant graph make it a viable topology for high-performance computing devices, such as networks-on-chip and cluster supercomputers. It was shown that the coordinates of the vertices can be determined as the minimum number of transitions along the generators from the initial vertex. Two virtual coordinate-based routing methods were developed. The first method entails restoring the vertex numbers and finding the difference between them, with the coordinates of the corresponding vertex setting the route. The second method involves calculating the difference between the final and initial vertex coordinates, while minimizing the route based on the proposed algorithm.

Keywords: circulant graph, network-on-chip, supercomputer cluster, virtual coordinate-based routing

Acknowledgments. This study was supported by the Russian Science Foundation (project no. 22-29-00979).

Figure Captions

Fig. 1. Circulant graph $C(25; 1, 7)$.

Fig. 2. Distribution of the circulant nodes by neighborhoods.

Fig. 3. Extension of the coordinates.

Fig. 4. Failures on the shortest routes, %.

Fig. 5. Relative increase in the total route length.

References

1. Kahle J.A., Moreno J., Dreps D. 2.1 Summit and Sierra: Designing AI/HPC supercomputers. *2019 IEEE Int. Solid-State Circuits Conf. – (ISSCC)*. IEEE, 2019, pp. 42–43. <https://doi.org/10.1109/ISSCC.2019.8662426>.
2. Jain A., Dwivedi R.K., Alshazly H., Kumar A., Bourouis S., Kaur M. Design and simulation of ring network-on-chip for different configured nodes. *Comput., Mater. Continua*, 2022, vol. 71, no. 2, pp. 4085–4100. <https://doi.org/10.32604/cmc.2022.023017>.
3. Bjerregaard T., Mahadevan S. A survey of research and practices of network-on-chip. *ACM Comput. Surv.*, 2006, vol. 38, no. 1, pp. 1–51. <https://doi.org/10.1145/1132952.1132953>.

4. Deng Y., Guo M., Ramos A.F., Huang X., Xu Z., Liu W. Optimal low-latency network topologies for cluster performance enhancement. *J. Supercomput.*, 2020, vol. 76, no. 12, pp. 9558–9584. <https://doi.org/10.1007/s11227-020-03216-y>.
5. Huang X., F. Ramos A., Deng Y. Optimal circulant graphs as low-latency network topologies. *J. Supercomput.*, 2022, vol. 78, no. 11, pp. 13491–13510. <https://doi.org/10.1007/s11227-022-04396-5>.
6. Belov A.V., Los A.B., Rozhkov M.I. Some classes of the MDS matrices over a finite field. *Lobachevskii J. Math.*, 2017, vol. 38, no. 5, pp. 880–883. <https://doi.org/10.1134/S1995080217050067>.
7. Monakhova E.A. A survey on undirected circulant graphs. *Discrete Math., Algorithms Appl.*, 2012, vol. 4, no. 1, art. 1250002. <https://doi.org/10.1142/S1793830912500024>.
8. Abrosimov M.B., Los I.V., Kostin S.V. Primitive homogeneous graphs with exponent 2 and number of vertices up to 16. *Izv. Sarat. Univ. Nov. Ser. Mat. Mekh. Inf.*, 2021, vol. 21, no. 2, pp. 238–245. (In Russian)
9. El-Mesady A., Hamed Y.S., Shabana H. On the decomposition of circulant graphs using algorithmic approaches. *Alexandria Eng. J.*, 2022, vol. 61, no. 10, pp. 8263–8275. <https://doi.org/10.1016/j.aej.2022.01.049>.
10. Romanov A., Myachin N., Sukhov A. Fault-tolerant routing in networks-on-chip using self-organizing routing algorithms. *IECON 2021 – 47th Annu. Conf. of the IEEE Industrial Electronics Society*. IEEE, 2021, pp. 1–6. <https://doi.org/10.1109/IECON48115.2021.9589829>.
11. Monakhova E.A., Monakhov O.G., Romanov A.Y. Routing algorithms in optimal degree four circulant networks based on relative addressing: Comparative analysis for networks-on-chip. *IEEE Trans. Network Sci. Eng.*, 2022, vol. 10, no. 1, pp. 413–425. <https://doi.org/10.1109/TNSE.2022.3211985>.
12. Sukhov A.M., Romanov A.Y. Serendipity: When research in one area leads to a positive result in another. URL: <https://cacm.acm.org/blogs/blog-cacm/270457-serendipity-when-research-in-one-area-leads-to-a-positive-result-in-another/fulltext>.
13. Das S., Karfa C., Biswas S. Formal modeling of network-on-chip using CFSM and its application in detecting deadlock. *IEEE Trans. Very Large Scale Integr. (VLSI) Syst.*, 2020, vol. 28, no. 4, pp. 1016–1029. <https://doi.org/10.1109/TVLSI.2019.2959618>.
14. Montanana J.M., de Andres D., Tirado F. Fault tolerance on NoCs. *2013 27th Int. Conf. on Advanced Information Networking and Applications Workshops*, IEEE, 2013, pp. 138–143. <https://doi.org/10.1109/WAINA.2013.221>.
15. Gabis A.B., Koudil M. NoC routing protocols – objective-based classification. *J. Syst. Archit.*, 2016, vols. 66–67, pp. 14–32. <https://doi.org/10.1016/j.sysarc.2016.04.011>.
16. Radetzki M., Feng Ch., Zhao X., Jantsch A. Methods for fault tolerance in networks-on-chip. *ACM Comput. Surv.*, 2013, vol. 46, no. 1, pp. 1–38. <https://doi.org/10.1145/2522968.2522976>.
17. Nadeem M.F., Imran M., Afzal Siddiqui H.M., Azeem M. Fault tolerance designs of interconnection networks. *Peer-to-Peer Networking Appl.*, 2023, vol. 16, no. 2, pp. 1125–1134. <https://doi.org/10.1007/s12083-023-01462-4>.
18. Demin A., Shakhov O., Sukhov A. Coaxing performance from the complexity of HPC. URL: <https://cacm.acm.org/blogs/blog-cacm/275134-coaxing-performance-from-the-complexity-of-hpc/fulltext>.
19. Jerger N.D.E., Krishna T., Peh L.-S. *On-Chip Networks*. Ser.: Synthesis Lectures on Computer Architecture. Martonosi M. (Ed.). Morgan & Claypool, 2017. 190 p. <https://doi.org/10.2200/S00772ED1V01Y201704CAC040>.

-
20. Dai Y., Zhang Y. Adaptive digital twin for vehicular edge computing and networks. *J. Commun. Inf. Networks*, 2022, vol. 7, no. 1, pp. 48–59. URL: <https://doi.org/10.23919/JCIN.2022.9745481>.
-

Для цитирования: Сухов А.М., Романов А.Ю., Глушак Е.В. Маршрутизация в циркулянтных графах на основе виртуальной координатной системы // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. 2023. Т. 165, кн. 3. С. 282–293. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.282-293>.

For citation: Sukhov A.M., Romanov A.Y., Glushak E.V. Routing in circulant graphs based on a virtual coordinate system. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2023, vol. 165, no. 3, pp. 282–293. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.282-293>. (In Russian)

ОРИГИНАЛЬНАЯ СТАТЬЯ

УДК 536.21

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.294-306

ЗАДАЧИ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В ХИМИЧЕСКИ РЕАГИРУЮЩИХ ПОГРАНИЧНЫХ СЛОЯХ НА ЗАТУПЛЕННЫХ ТЕЛАХ

О. В. Тушавина, М. С. Егорова

*Московский авиационный институт (национальный исследовательский
университет), г. Москва, 125993, Россия*

Аннотация

Рассмотрена нелинейная система дифференциальных уравнений в частных производных, описывающая пограничный слой, для решения которой широко используют численные методы. Здесь на основе переменных Дородницына–Лиза проведен анализ и сделан вывод формул для определения тепловых потоков к телу от реагирующего сжимаемого градиентного пограничного слоя и температур тела.

Ключевые слова: тепломассоперенос, пограничный слой, численные методы, теплообмен

Введение

В работе рассмотрена нелинейная система дифференциальных уравнений в частных производных, описывающая пограничный слой. Для ее решения, как правило, используют численные методы (см., например, [1, 2]). В частности, ранее для реагирующих пограничных слоев широко применялся метод интегральных соотношений Кармана [3]. Однако для решения сопряженных задач теплообмена в пограничном слое и теплопроводности в теле метод интегральных соотношений не годится, так как на границах сопряжения требуется непрерывность не интегральных, а теплогазодинамических характеристик.

Наиболее часто используется метод сведения систем уравнений пограничного слоя в частных производных к системам обыкновенных дифференциальных уравнений. Этот метод основан на применении преобразования Дородницына–Лиза [1, 4], с помощью которого можно проводить как анализ тепломассопереноса, так и расчет характеристик пограничного слоя – компонентов вектора скорости, плотности, энтальпии, тепловых потоков, концентраций компонентов газодинамической смеси в локально-одномерной (автомодельной) постановке по толщине пограничного слоя. При этом получается нелинейная система обыкновенных дифференциальных уравнений, которую анализировать и решать существенно легче, чем систему уравнений в частных производных. Решению подобных математических задач посвящено достаточно много работ, относящихся к процессам теплопроводности при воздействии лазерного излучения (например, [5–9]), а также высоких температур на элементы конструкций аэрокосмического назначения (например, [10–12]).

1. Сведение системы уравнений пограничного слоя к системе обыкновенных дифференциальных уравнений

Рассмотрим систему уравнений пограничного слоя на затупленном теле (рис. 1) в криволинейной локальной системе координат, где одна переменная отсчитывается от критической точки вдоль поверхности тела, а другая – от поверхности вдоль внешней нормали к телу.

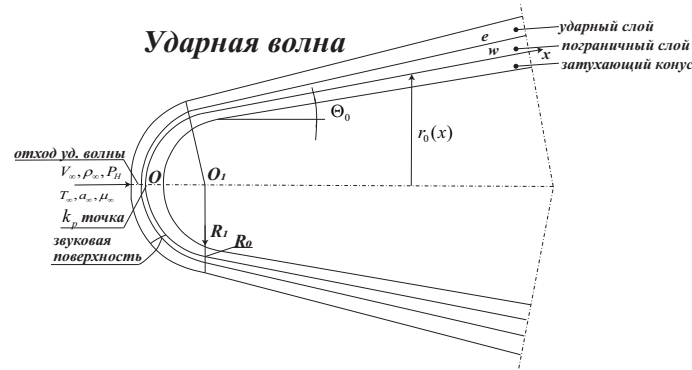


Рис. 1. Постановка задачи

Введем преобразования Дородницына–Лиза

$$\rho \bar{x} = \int_0^x \rho_e u_e \mu_e r_0^{2s} dx, \quad (1)$$

$$\eta = \frac{\rho_e u_e r_0^s}{\sqrt{2\bar{x}}} \int_0^y \frac{\rho}{\rho_e} dy, \quad (2)$$

где индекс «е» связан с характеристиками на внешней границе пограничного слоя, а функции $u_e(x)$ и $\rho_e(x)$ связаны уравнением Бернулли вдоль линий тока на внешней границе «е» пограничного слоя

$$\frac{dp_e}{dx} = -\rho_e u_e \frac{du_e}{dx}. \quad (3)$$

Введем функцию тока $\psi(\bar{x}, \eta)$ и связанную с ней относительную функцию тока $f(\eta)$

$$\psi(\bar{x}, \eta) = \frac{\sqrt{2\bar{x}}}{\rho_e r_0^s} f(\eta), \quad (4)$$

$$u = u_e(x) f(\eta). \quad (5)$$

Уравнение неразрывности для двумерного стационарного течения сжимаемого газа имеет вид

$$\frac{\partial(\rho u r_0^s)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v r_0^s)}{\partial y} = 0, \quad (6)$$

а уравнение состояния в соответствии с законом Дальтона – вид

$$p = \sum_i p_i = T \sum_i \rho_i R_i = \rho \bar{R} T, \quad (7)$$

где $\bar{R} = \sum_i C_i R_i$, $C_i = \frac{\rho_i}{\rho}$. Соотношения (4) и (5) автоматически удовлетворяют уравнению неразрывности (6) (с использованием уравнения состояния (7) и уравнению Бернулли (3)), то есть эти уравнения не рассматриваются, если использовать переменные Дородницына–Лиза (1), (2) и автомодельные переменные (4), (5).

Известно, что уравнение сохранения импульса для пограничного слоя в проекции на ось Ox имеет вид

$$\rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right). \quad (8)$$

Уравнение диффузии для конкретного компонента с концентрацией $C_i = \rho_i / \rho$ выводится на основе закона Фика и скорости образования i -го компонента и имеет вид

$$\rho u \frac{\partial C_i}{\partial x} + \rho v \frac{\partial C_i}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_{12} \frac{\partial C_i}{\partial y} \right) + w_i, \quad (9)$$

где $w_i = k \frac{\partial C_i}{\partial t}$, k – постоянное значение скорости образования i -го компонента.

Уравнение энергии описывает перенос энергии конвекцией, теплопроводностью, давлением, диффузией и имеет вид

$$\begin{aligned} \rho u \frac{\partial I}{\partial x} + \rho v \frac{\partial I}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{\mu}{\text{Pr}} \frac{\partial I}{\partial y} + \mu \left(1 - \frac{1}{\text{Pr}} \right) \frac{\partial u^2}{2 \partial y} \right] - \\ - \frac{\partial}{\partial y} \left[\left(\frac{1}{Le} - 1 \right) \rho D_{12} \sum_i h_i \frac{\partial C_i}{\partial y} \right]. \end{aligned} \quad (10)$$

Подставив переменные (4) и (5) в уравнения сохранения импульса (8), концентраций (9) и энергии (10) и введя безразмерные переменные

$$\bar{c}_i(\eta) = \frac{C_i(\eta)}{C_{ie}}, \quad (11)$$

$$\bar{I}(\eta) = \frac{I(\eta)}{I_e}, \quad (12)$$

получим три уравнения относительно $f(\eta)$, $\bar{C}_i(\eta)$, $\bar{I}(\eta)$:

– уравнение сохранения импульса

$$\frac{d}{d\eta} \left(D \frac{d^2 f}{d\eta^2} \right) + f \frac{d^2 f}{d\eta^2} + \frac{2\bar{x}}{u_e} \frac{du_e}{d\bar{x}} \left[\frac{\rho_e}{\rho} - \left(\frac{df}{d\eta} \right)^2 \right] = 0; \quad (13)$$

– уравнение концентраций (уравнение неразрывности для каждого компонента смеси)

$$\frac{d}{d\eta} \left(\frac{D}{Sm} \frac{d}{d\eta} \bar{C}_i \right) + f \frac{d}{d\eta} \bar{C}_i = \frac{2\bar{x} f \bar{C}_i}{C_{ie}} \frac{d(C_{ie})}{d\bar{x}} - \frac{2\bar{x} w_i}{\rho \rho_e u_e^2 \mu_e r_0^{2s} C_{ie}}; \quad (14)$$

– уравнение сохранения энергии

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\eta} \left(\frac{D}{\text{Pr}} \frac{d\bar{I}}{d\eta} \right) + f \frac{d\bar{I}}{d\eta} = \frac{df}{d\eta} \frac{2\bar{x} \bar{I}}{I_e} \frac{dI_e}{d\bar{x}} + \frac{d}{d\eta} \left[\frac{D}{Sm} \left(\frac{1}{Le} - 1 \right) \sum_i \frac{h_i C_{ie}}{I_e} \frac{d}{d\eta} C_e \right] + \\ + \frac{u_e^2}{I_e} \left[\left(1 - \frac{1}{\text{Pr}} \right) D \frac{df}{d\eta} \frac{d^2 f}{d\eta^2} \right], \end{aligned} \quad (15)$$

где $D = \rho \mu / \rho_e \mu_e$, $\text{Pr} = \frac{\mu c_p}{\lambda}$ – число Прандтля, $Sm = \frac{\mu}{\rho D_{12}}$ – число Шмидта, $Le = \frac{\text{Pr}}{Sm}$ – число Льюиса.

Система обыкновенных дифференциальных уравнений (13)–(15) является нелинейной, и для ее решения используются численные методы. Однако существует ряд

частных случаев, для которых можно получить аналитические решения. Для решения этой системы необходимо задать граничные условия на внешней границе «е» и внутренней границе пограничного слоя.

При $y = 0, \eta = 0$ имеем

$$\frac{d}{d\eta} f(0) = \frac{u_w}{u_e} = 0, \quad (16)$$

$$f(0) = f_w, \quad f(0) = 0. \quad (17)$$

В (17), если есть унос массы, то $f(0) = f_w$; если нет уноса массы, то $f(0) = 0$,

$$\bar{C}_i(0) = \bar{C}_{iw} = \frac{C_{iw}}{C_{ie}}, \quad (18)$$

$$\bar{I}(0) = \bar{I}_w = \frac{I_w}{I_e}. \quad (19)$$

При $y \rightarrow \infty, \eta \rightarrow \infty$ имеем

$$\frac{d}{d\eta} f(\infty) = \frac{d}{d\eta} f_e \rightarrow 1, \quad (20)$$

$$f(\infty) = f_e \rightarrow 0, \quad (21)$$

$$\bar{C}_i(\infty) = \bar{C}_{ie} \rightarrow 1, \quad (22)$$

$$\bar{I}(\infty) = \bar{I}_e \rightarrow 1. \quad (23)$$

Таким образом, на внешней границе искомые функции $\frac{d}{d\eta} f_e, f_e, \bar{C}_{ie}, \bar{I}_e$ известны, а на границе w известны только $\frac{d}{d\eta} f(0) = 0$ и $f(0) = 0$, если нет уноса массы. Поэтому температуру T_w и энтальпию I_w газа на стенке определим из решения задачи теплопроводности в обтекаемом теле по найденным тепловым потокам к стенке. Концентрации атомарных и молекулярных компонентов на стенке в первом приближении можно взять из известных соотношений.

Кроме того, в правые части уравнений (13)–(15) и граничных условий (16)–(23) входят газодинамические характеристики $u_e(x), \rho_e(x), C_{ie}(x), I_e(x)$ на внешней границе пограничного слоя, которые можно определить следующим образом:

$u_e(x)$ – из уравнения Бернулли (3) по распределению давления $p_e(x)$ вдоль оси Ox ;

$T_e(x)$ (следовательно, и $I_e(x), \rho_e(x), C_{Ae}(x)$) можно найти из энтропических соотношений $\frac{T_e(x)}{T_0} = \left(\frac{p_e(x)}{p_0}\right)^{\frac{k-1}{k}}$, $x \geq 0, y = \delta(x)$ и $\frac{C_{Ae}(x)}{C_{A0}} = \left(\frac{p_{Ae}(x)}{p_{A0}}\right)^{1/k}$, $x > 0, y = \delta(x)$, причем для бинарного газа $C_{1e} = C_{Ae}, C_{2e} = C_{Me} = 1 - C_{Ae}$.

Таким образом, задача (13)–(23) о градиентном, сжимаемом, химически реагирующем пограничном слое в переменных Дородницына–Лиза замкнута.

После определения энтальпии $\bar{I}(x)$ и концентраций $\bar{C}_i(x)$ можно вычислить плотность тепловых потоков на стенке по аналитической формуле

$$q_w = \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial y} + \rho D_{12} h_{Aw}^0 \frac{\partial C_A}{\partial y} \right)_{y=0} - q_\varepsilon, \quad (24)$$

где $q_\varepsilon = \varepsilon \sigma T^4|_{y=0}$ – лучистый тепловой поток от стенки при температуре газа T_w на стенке.

2. Тепломассоперенос в ударном слое в окрестности критической точки затупленного тела

При высокоскоростном обтекании затупленных тел между отошедшей ударной волной и телом образуется сжатый газодинамический ударный слой, для которого непосредственно перед затуплением скорость газодинамического течения дозвуковая, поэтому в области, ограниченной прямой частью ударной волны, затуплением и звуковыми поверхностями (линиями в двумерном случае), течение несжимаемое, и уравнение неразрывности существенно упрощается и приобретает вид

$$\frac{\partial(ur_0^s)}{\partial x} + \frac{\partial(vr_0^s)}{\partial y} = 0.$$

Кроме того, на прямой части ударной волны выполняется соотношение Прандтля

$$V_\infty V_1 = a^2, \quad (25)$$

где V_1 – скорость непосредственно за ударной волной, $V = \sqrt{u^2 + v^2}$, a – критическая скорость звука (скорость звука в газе, движущемся со скоростью звука [13]). Таким образом, в соответствии с (25), чем выше сверхзвуковая скорость набегающего потока V_∞ , тем ниже дозвуковая скорость V_1 за прямой частью ударной волны. В критической точке O (рис. 1) скорость равна нулю ($u = 0$, $v = 0$), поэтому газодинамические характеристики в этой точке называют характеристиками торможения, обозначают p_e , T_0 , C_{i0} и вычисляют по известным соотношениям, зависящим от числа M_∞ набегающего потока. На линии полного торможения – линии тока, проходящей через критическую точку, продольная скорость $u = (0, y) = 0$, $v(0, y) > 0$, $\frac{\partial u(0, y)}{\partial x} \gg u(0 + 0, y)$. В соответствии с этим в малой окрестности критической точки и в ней самой уравнения пограничного слоя не выполняются. Однако вязкое течение в окрестности критической точки присутствует из-за вертикальной компоненты $v(x, y)$ вектора скорости вследствие того, что за ударной волной $v(x, y) > 0$, а на границе тела $v(x, y) = 0$. Таким образом, в окрестности критической точки уравнения теплогазодинамики в газодинамических переменных решать сложно, но можно – в переменных Дородницына–Лиза, в том числе в критической точке.

Запишем систему уравнений (13)–(15) для бинарной смеси диссоциирующего воздуха $0.235O_2 + 0.765N_2$, обозначив $C_1 = A \equiv \alpha$, $C_2 = C_M \equiv 1 - \alpha$:

$$\frac{d}{d\eta} \left(D \frac{d^2 f}{d\eta^2} \right) + f \frac{d^2 f}{d\eta^2} = \frac{2\bar{x}}{u_e} \frac{du_e}{d\bar{x}} \left(\left(\frac{df}{d\eta} \right)^2 - \frac{\rho_e}{\rho} \right), \quad (26)$$

$$\left(\frac{D}{Sm} \right) \frac{\partial}{\partial \eta} \bar{\alpha} = \frac{df}{d\eta} \frac{2\bar{x}\alpha}{\alpha_e} \frac{d\alpha_e}{d\bar{x}} - \frac{2\bar{x}w_A}{\rho\rho_e u_e^2 \mu_e r_0^{2s} \alpha_e}, \quad (27)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\eta} \left(\frac{D}{Pr} \frac{\partial}{\partial \eta} \bar{I} \right) + f \frac{\partial}{\partial \eta} \bar{I} &= \frac{df}{d\eta} \frac{2\bar{x}\bar{I}}{I_e} \frac{dI_e}{d\bar{x}} + \left[\frac{u_e^2}{I_e} \left(1 - \frac{1}{Pr} \right) D \frac{df}{d\eta} \frac{d^2 f}{d\eta^2} \right] + \\ &+ \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{D}{Sm} \left(\frac{1}{Le} - 1 \right) \frac{(h_A - h_M)\alpha_e}{I_e} \frac{\partial}{\partial \eta} \bar{\alpha} \right], \end{aligned} \quad (28)$$

где в последнем слагаемом уравнения (28) использовано равенство (из последнего слагаемого уравнения (10))

$$\sum_i h_i \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial y} = h_A \frac{\partial \bar{C}_A}{\partial y} + h_M \frac{\partial \bar{C}_M}{\partial y} = h_A \frac{\partial \bar{\alpha}}{\partial y} + h_M \frac{\partial (1 - \bar{\alpha})}{\partial y} = (h_A - h_M) \frac{\partial \bar{\alpha}}{\partial y}. \quad (29)$$

Кроме того, из (29) имеем

$$h_A - h_M = \int_0^T c_{pA} dT + h_A^0 - \int_0^T c_{pM} dT - h_M^0 \approx h_A^0, \quad (30)$$

где h_A^0 – энергия диссоциации молекул кислорода и азота; энергия диссоциации $(h_A^0)_{O_2} = (U_d)_{O_2} = 15540$ кДж/кг для кислорода и $(h_A^0)_{N_2} = (U_d)_{N_2} = 33600$ кДж/кг для азота. Чтобы получить тепловой поток q_w в форме (24) в виде двух слагаемых – конвективного и диффузионного, необходимо проинтегрировать уравнение (27) для относительных концентраций $\bar{\alpha}$ и уравнение (28) для относительных энтальпий $\bar{I}$, полученные распределения продифференцировать по переменной y и положить $y = 0$, а затем полученные производные на границе подставить в (24). Кроме того, для получения профиля скорости $\frac{df(\eta)}{d\eta} = u/u_e$ необходимо дважды проинтегрировать по переменной уравнение сохранения импульса (26). В указанных уравнениях правые части зависят от продольной переменной $\bar{x}$. Поэтому для интегрирования уравнений (26)–(30) используем следующие предположения:

- пограничный слой «замороженный», то есть $w_A = 0$ в уравнении (27);
- числа Pr и Le примерно равны единице;
- в правой части уравнения (26) множитель $\left(\frac{df}{d\eta}\right)^2 - \frac{\rho_e}{\rho} \approx 0$ [14]; это предположение можно использовать для окрестности критической точки (но не для нее);
- в правых частях множителя $\frac{\bar{x}}{u_e} \frac{du_e}{d\bar{x}}, \frac{\bar{x}}{\alpha_e} \frac{d\alpha_e}{d\bar{x}}, \frac{\bar{x}}{I_e} \frac{dI_e}{d\bar{x}}$ постоянны.

При этих предположениях система уравнений (26)–(28) трансформируется в систему

$$\frac{d}{d\eta} \left(D \frac{d^2 f}{d\eta^2} \right) + f \frac{d^2 f}{d\eta^2} = 0, \quad (31)$$

$$\frac{d}{d\eta} \left(D \frac{d\bar{\alpha}}{d\eta} \right) + f \frac{d\bar{\alpha}}{d\eta} = 0, \quad (32)$$

$$\frac{d}{d\eta} \left(D \frac{d\bar{I}}{d\eta} \right) + f \frac{d\bar{I}}{d\eta} = 0. \quad (33)$$

Проинтегрируем уравнения (31)–(33), используя функцию f в качестве параметра и заметив, что они похожи друг на друга относительно переменных $\frac{d^2 f(\eta)}{d\eta^2}, \frac{d\bar{\alpha}(\eta)}{d\eta}, \frac{d\bar{I}(\eta)}{d\eta}$, то есть обозначив

$$z(\eta) = \begin{pmatrix} \frac{d^2 f(\eta)}{d\eta^2} \\ \frac{d\bar{\alpha}(\eta)}{d\eta} \\ \frac{d\bar{I}(\eta)}{d\eta} \end{pmatrix}, \quad (34)$$

проинтегрируем уравнение по переменной η

$$D \frac{dz}{d\eta} = -fz \quad (35)$$

и получим

$$z(\eta) = C_1 e^{-(f/D)\eta} \quad (36)$$

или

$$\begin{pmatrix} \frac{d^2 f(\eta)}{d\eta^2} \\ \frac{d\bar{\alpha}(\eta)}{d\eta} \\ \frac{d\bar{I}(\eta)}{d\eta} \end{pmatrix} = C_1 e^{-(f/D)\eta}. \quad (37)$$

Проинтегрировав (37) еще раз, получим

$$\left(\begin{array}{c} \frac{d^2 f(\eta)}{d\eta^2} \\ \frac{d\bar{\alpha}(\eta)}{d\eta} \\ \frac{dI(\eta)}{d\eta} \end{array} \right) = C_1 \left(-\frac{D}{f} \right) e^{-(f/D)\eta} + C_2. \quad (38)$$

Поскольку граничные условия (16)–(23) для каждого из трех уравнений (21) различны, определим постоянные интегрирования C_1 , C_2 для второго и третьего уравнений. Для второго уравнения используем граничные условия (17) и (22):

$$\bar{\alpha}(\eta) = C_1 \left(-\frac{D}{f} \right) e^{-(f/D)\eta} + C_2; \quad (39)$$

$$\bar{\alpha}(0) = \bar{\alpha}_w = -1 \frac{D}{f} + C_2; \quad \bar{\alpha}(\infty) = \bar{\alpha}_e = C_2, \quad C_2 = 1; \quad C_1 = (1 - \bar{\alpha}) f/D.$$

Подставив C_1, C_2 в (39), найдем $\bar{\alpha}(\eta)$

$$\frac{\alpha(\eta) - \alpha_e}{\alpha_w - \alpha_e} = e^{-(f/D)\eta}. \quad (40)$$

Аналогично, используя граничные условия (19) и (23), определим распределение энтальпий

$$\frac{I(\eta) - I_e}{I_w - I_e} = e^{-(f/D)\eta}. \quad (41)$$

Проинтегрируем теперь первое уравнение в (37) относительно $f(\eta)$, используя граничные условия (16), (17), (20), и получим

$$f(\eta) = C_1 \left(-\frac{D}{f} \right) \left(-\frac{D}{f} \right) e^{-(f/D)\eta} + C_2 \eta + C_3. \quad (42)$$

$f(0) = f_w = 0$ для непроницаемой стенки (нет уноса массы):

$$0 = C_1 \left(\frac{D}{f} \right)^2 + C_3; \quad (43)$$

$$f'(0) = 0, \quad 0 = -1 \frac{D}{f} + C_2; \quad (44)$$

$$f'(\infty) = 1, \quad 1 = C_2. \quad (45)$$

Из (42)–(45) определим постоянные интегрирования C_1, C_2, C_3 :

$$C_2 = 1, \quad C_1 = f/D, \quad C_3 = -D/f. \quad (46)$$

Подставив (46) в (42), найдем распределение $f(\eta)$:

$$f(\eta) = (D/f) e^{-(f/D)\eta} + \eta - D/f. \quad (47)$$

Таким образом, функции (40), (41), (47) – решения уравнений (38) относительно функций $\alpha(\eta)$, $I(\eta)$, $f(\eta)$ с граничными условиями (34)–(40). Для определения тепловых потоков за счет конвекции и диффузии необходимо подставить полученные функции в выражение (24) с учетом (31). Для этого необходимо в (40), (41) вычислить производные по переменной y и в полученных соотношениях положить $y = 0$. Из (41) имеем

$$I(\eta) = I_e + (I_w - I_e) e^{-(f/D)\eta},$$

$$\begin{aligned}
c_p T(\eta) + \frac{u^2(\eta)}{2} + h_A^0 &= I_e + (I_w - I_e) e^{-(f/D)\eta}, \\
\left(c_p \frac{\partial T}{\partial y} + u \frac{\partial u}{\partial y} \right)_{y=0} &= (I_w - I_e) \left(-\frac{f}{D} \right) e^{-(f/D)\eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \Big|_{y=0}, \\
\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0} &= \lambda \frac{I_w - I_e}{(c_p)_{cp}} \left(-\frac{f}{D} \right) \frac{d\eta}{dy} \Big|_{y=0},
\end{aligned} \tag{48}$$

где $(c_p)_{cp}$ – учрежденная величина по толщине пограничного слоя. Вычислим приближенно $\partial \eta / \partial y$. Из (1) и (2) имеем $(\rho / \rho_e) \approx 1$,

$$\eta \approx \frac{\rho_e u_e r_0^s y}{\sqrt{2 \rho_e u_e \mu_e r_0^{2s} x}} = \frac{\sqrt{\rho_e u_e} y}{\sqrt{2 \mu_e x}} = \frac{\sqrt{\rho_e x \frac{du_e}{dx}}}{\sqrt{2 \nu x}} = \frac{1}{\sqrt{2 \mu_e}} \left(\rho_e \frac{du_e}{dx} \right)^{1/2} y.$$

Здесь для окрестности критической точки использовано равенство

$$u_e = x \left(\frac{du_e}{dx} \right). \tag{49}$$

Таким образом,

$$\frac{\partial \eta}{\partial y} \Big|_{y=0} = \frac{1}{\sqrt{2 \mu_e}} \left(\rho_e \frac{du_e}{dx} \right)^{1/2}. \tag{50}$$

Подставив (50) в (48) и учитывая (49), получим для конвективного теплового потока в окрестности критической точки (но не в ней самой)

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0} = \frac{\lambda}{(c_p)_{cp}} (c_{pe} T_e - c_{pw} T_w) \left(\frac{f}{D} \right) \frac{1}{\sqrt{2 \mu_e}} \left(\rho_e \frac{du_e}{dx} \right)^{1/2}. \tag{51}$$

Поскольку $\frac{\lambda}{c_p} = \frac{\lambda \mu}{\mu \cdot c_p} = \frac{\mu}{Pr}$ и $\frac{\lambda}{c_p} = \mu$ при $Pr = 1$, из (51) при $Pr = 1$ и $\mu \approx \mu_e$ имеем

$$\lambda \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0} = \frac{1}{\sqrt{2}} (c_p)_{cp} (T_e - T_w) \frac{f}{D} \left(\rho_e \mu_e \frac{du_e}{dx} \right)^{1/2}_{y=0}, \tag{52}$$

где

$$T_e = \left(1 + r \frac{k-1}{2} M_\infty^2 \right), \quad r_{lam} = 0.845, \quad r_{turb} = 0.895.$$

Аналогично, продифференцировав (40) по переменной y , при $y = 0$ получим

$$\frac{\partial \alpha}{\partial y} \Big|_{y=0} = (\alpha_w - \alpha_e) \left(-\frac{f}{D} \right) e^{-(f/D)\eta} \frac{d\eta}{dy} \Big|_{y=0}.$$

Подставив сюда (50), получим для диффузионного потока к стенке в окрестности критической точки уравнение

$$\rho D_{12} \frac{\partial \alpha}{\partial y} \Big|_{y=0} = \rho D_{12} (\alpha_e - \alpha_w) \left(\frac{f}{D} \right) \frac{1}{\sqrt{2 \mu_e}} \left(\rho_e \frac{du_e}{dx} \right)^{1/2}_{y=0}. \tag{53}$$

В уравнение (52) для конвективного теплового потока и (53) для диффузионного потока входит относительная функция тока $f(\eta)$, и на границе тела при $y = 0$ ($\eta = 0$) получим, что конвективный и диффузионный тепловые потоки будут отсутствовать, что не соответствует действительности. Однако функцию $f(\eta)$ можно

разложить в ряд Тейлора по степеням переменной η в окрестности $\eta = 0$, в результате получим

$$f(\eta) = f(0) + \frac{df(0)}{d\eta}\eta + \frac{d^2f(0)}{d^2\eta}\frac{\eta^2}{2} + \dots \quad (54)$$

Удержав члены до второй производной включительно и учитывая граничные условия (16) и (17), получим, что

$$f(\eta) \approx \frac{d^2f(0)}{d^2\eta}\frac{\eta^2}{2}. \quad (55)$$

Осталось определить функцию $f(\eta)$.

Из решения (47) линеаризованного уравнения (37) для функции $f(\eta)$ без применения численных процедур невозможно получить функцию $f(\eta)$, так как это выражение является трансцендентным и очень сильно упрощенным при линеаризации. Однако в [15] затабулировано численное решение полного уравнения сохранения импульса (26) с градиентными слагаемыми в правой части, поскольку при $x \rightarrow 0$ слагаемые в правых частях, зависящих от $\bar{x}$, стремятся к нулю в уравнениях (27) и (28), а в (26) правая часть при $\bar{x} \rightarrow 0$ является постоянной: $\lim_{\bar{x} \rightarrow 0} \frac{\bar{x}}{u_e} \frac{du_e}{dx} = 1$.

Ниже приведено решение следующей задачи Коши, полученное численным методом Рунге–Кутты:

$$\begin{aligned} \frac{d^3}{d^3\eta}f + f \frac{d^2}{d^2\eta}f - \frac{d}{d\eta}f^2 + 1 &= 0, \\ f(0) &= 0, \quad \frac{d}{d\eta}f(0) = 0, \quad \frac{d}{d\eta}f(\infty) = 1. \end{aligned}$$

Чтобы использовать его в приближенно-аналитических решениях (52), (53), сгладим функцию по методу наименьших квадратов

$$f(\eta) = -3.09510^{-3}\eta^3 + 0.251\eta^2 + 0.248\eta - 0.025,$$

причем $f(0) \approx 0$, $\frac{d}{d\eta}f(0) \approx 0$, $\frac{d^2}{d^2\eta}f(0) = \frac{0.502}{2} = 0.251$, поскольку $f(\eta) = \frac{d^2}{d^2\eta}f(0)\frac{\eta^2}{2} = 0.502\frac{\eta^2}{2}$. В соответствии с этими рассуждениями в выражениях (52) и (53) сомножитель $f(\eta)|_{\eta=0}$ равен $f(\eta)|_{\eta \rightarrow 0} \approx \frac{d^2}{d^2\eta}f(0) = 0.251$. На рис. 2 приведена зависимость $f(\eta)$ в виде кубической параболы; средне-интегральное значение равно 1.903.

Осталось в формулах (52) и (53) определить du_e/dx в окрестности критической точки, где $u_e = x \frac{du_e}{dx}$, $x \neq 0$, но находится в окрестности точки торможения. Производную du_e/dx можно определить из уравнения Бернулли

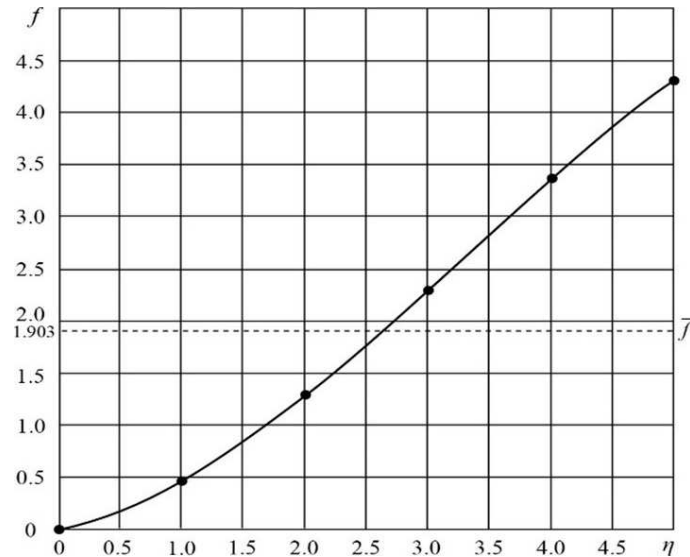
$$\frac{dp_e}{dx} = -\rho_e u_e \frac{du_e}{dx} \quad \text{или} \quad \frac{dp_e}{dx} = -\rho_e x \left(\frac{du_e}{dx} \right)^2,$$

откуда получим

$$\frac{du_e}{dx} = \sqrt{\frac{-1}{x\rho_e} \frac{dp_e}{dx}}, \quad \frac{dp_e}{dx} < 0.$$

3. Выводы

1. На основе переменных Дородницына–Лиза сформулирована задача моделирования течения и тепломассопереноса в реагирующем газодинамическом пограничном слое в бинарном приближении – задача определения скоростей, концентраций атомарной компоненты и энтальпий в критической точке и в окрестности критической точки затупленного тела.

Рис. 2. Зависимость $f(\eta)$ по толщине пограничного слоя

2. В предположении «замороженности» пограничного слоя, с учетом равенства единице чисел Прандтля и Льюиса, получены аналитические решения для относительных скоростей концентраций и энтальпий в критической точке и в ее окрестности, а также для диффузионного и теплового потоков. При этом получены аналитические выражения для относительной функции тока и относительной скорости в пограничном слое.

3. Приближенно-аналитически решена система уравнений градиентного пограничного слоя в окрестности критической точки для реагирующего бинарного газа, получены замкнутые выражения для диффузионного и тепловых потоков в зависимости от продольной переменной. На основе баланса диффузионных, тепловых и лучистых тепловых потоков получено распределение температур в окрестности критической точки в зависимости от продольной переменной.

Благодарности. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект № 23-19-00684.

Литература

1. Галицейский Б.М., Совершенный В.Д., Формалев В.Ф., Черный М.С. Тепловая защита лопаток турбин. М.: МАИ, 1996. 353 с.
2. Формалев В.Ф., Колесник С.А. Математическое моделирование сопряженного теплообмена между вязкими газодинамическими течениями и анизотропными телами. М.: ЛЕНАНД, 2019. 320 с.
3. Авдудевский В.С., Галицейский Б.М., Глебов Г.А., Данилов Ю.И., Дрейцер Г.А., Калинин Э.К., Кошкин В.К., Михайлова Т.В., Молчанов А.М., Рыжов Ю.А., Солнцев В.П. Основы теплопередачи в авиационной и ракетно-космической технике. М.: Машиностроение, 1992. 624 с.
4. Дорренс У.Х. Гиперзвуковые течения вязкого газа. М.: Мир, 1966. 440 с.

5. *Bodryshev V.V., Rabinskiy L.N., Orekhov A.A.* Analysis of interaction structure of circular laminar jets using digital image processing // *J. Visualization*. 2022. V. 25, No 33. P. 1137–1150. <https://doi.org/10.1007/s12650-022-00851-w>.
6. *Orekhov A., Rabinskiy L., Fedotenkov G.* Analytical model of heating an isotropic half-space by a moving laser source with a Gaussian distribution // *Symmetry*. 2022. V. 14, No 4. Art. 650. <https://doi.org/10.3390/sym14040650>.
7. *Fedotenkov G., Rabinskiy L., Lurie S.* Conductive heat transfer in materials under intense heat flows // *Symmetry*. 2022. V. 14, No 9. Art. 1950. <https://doi.org/10.3390/sym14091950>.
8. *Dobryanskiy V.N., Fedotenkov G.V., Orekhov A.A., Rabinskiy L.N.* Estimation of finite heat distribution rate in the process of intensive heating of solids // *Lobachevskii J. Math.* 2022. V. 43, No 7. P. 1832–1841. <https://doi.org/10.1134/S1995080222100079>.
9. *Orekhov A.A., Rabinskiy L.N., Fedotenkov G.V., Hein T.Z.* Heating of a half-space by a moving thermal laser pulse source // *Lobachevskii J. Math.* 2021. V. 42, No 8. P. 1912–1919. <https://doi.org/10.1134/S1995080221080229>.
10. *Formalev V.F., Kolesnik S.A., Kuznetsova E.L.* Heat and mass transfer on the side surfaces of blunt nose parts of hypersonic aircraft // *High Temp.* 2022. V. 60, Suppl. 2. P. S288–S291. <https://doi.org/10.1134/S0018151X21050060>.
11. *Astapov A.N., Zhavoronok S.I., Kurbatov A.S., Rabinskiy L.N., Tushavina O.V.* Main problems in the creation of thermal-protection systems based on structurally heterogeneous materials and the methods of their solution // *High Temp.* 2021. V. 59, No 2–6. P. 346–372. <https://doi.org/10.1134/S0018151X21020012>.
12. *Formalev V.F., Garibyan B.A., Orekhov A.A.* Mathematical modeling of heat transfer in anisotropic half-space based on the generalized parabolic wave heat transfer equation // *Lobachevskii J. Math.* 2022. V. 43, No 7. P. 1842–1849. <https://doi.org/10.1134/S1995080222100110>.
13. *Аржанников Н.С., Садекова Г.С.* Аэродинамика больших скоростей. М.: Высш. школа, 1965. 559 с.
14. *Полежаев Ю.В., Юревич Ф.Б.* Тепловая защита. М.: Энергия, 1976. 392 с.
15. *Шлихтинг Г.* Теория пограничного слоя. М.: Наука, 1969. 391 с.

Поступила в редакцию 28.08.2023

Принята к публикации 26.09.2023

Тушавина Ольга Валериановна, доцент, заведующий кафедрой 610

Федеральное государственное бюджетное учреждение высшего образования
«Московский авиационный институт (национальный исследовательский
университет)»

Волоколамское ш., д. 4, г. Москва, 125993, А-80, ГСП-3, Россия

E-mail: tushavinaov@mai.ru

Егорова Мария Сергеевна, ассистент кафедры 610

Федеральное государственное бюджетное учреждение высшего образования
«Московский авиационный институт (национальный исследовательский
университет)»

Волоколамское ш., д. 4, г. Москва, 125993, А-80, ГСП-3, Россия

E-mail: egorovams@mai.ru

ISSN 2541-7746 (Print)

ISSN 2500-2198 (Online)

UCHENYE ZAPISKI KAZANSKOGO UNIVERSITETA.
SERIYA FIZIKO-MATEMATICHESKIE NAUKI
(Proceedings of Kazan University. Physics and Mathematics Series)
2023, vol. 165, no. 3, pp. 294–306

ORIGINAL ARTICLE

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.294-306

Problems of Heat and Mass Transfer
in Chemically Reacting Boundary Layers on Blunted Bodies

O.V. Tushavina*, M.S. Egorova**

Moscow Aviation Institute (National Research University), Moscow, 125993 Russia

E-mail: *tushavinaov@mai.ru, **egorovams@mai.ru

Received August 28, 2023; Accepted September 26, 2023

Abstract

This article considers a nonlinear system of partial differential equations describing the boundary layer. Such a system is commonly solved by numerical methods. Here, the Dorodnitsyn–Lees variables were used to carry out an analysis and derive the formulas for calculating the body temperatures and the heat fluxes to the body generated by the reacting compressible gradient boundary layer.

Keywords: heat and mass transfer, boundary layer, numerical methods, heat exchange

Acknowledgments. This study was supported by the Russian Science Foundation (project no. 23-19-00684).

Figure Captions

Fig. 1. Problem statement.

Fig. 2. The $f(\eta)$ function along boundary layer thickness.

References

1. Galitseiskii B.M., Sovershennyi V.D., Formalev V.F., Chernyi M.S. *Teplovaya zashchita lopatok turbin* [Heat Shielding of Turbine Blades]. Moscow, MAI, 1996. 353 p. (In Russian)
2. Formalev V.F., Kolesnik S.A. *Matematicheskoe modelirovanie sopryazhennogo teploobmena mezhdru vyazkimi gazodinamicheskimi techeniyami i anizotropnymi telami* [Mathematical Modeling of Coupled Heat Transfer between Viscous Gas-Dynamic Flows and Anisotropic Bodies]. Moscow, LENAND, 2019. 320 p. (In Russian)
3. Avduevskii V.S., Galitseiskii B.M., Glebov G.A., Danilov Yu.I., Dreitser G.A., Kalinin E.K., Koshkin V.K., Mikhailova T.V., Molchanov A.M., Ryzhov Yu.A., Solntsev V.P. *Osnovy teploperedachi v aviatsionnoi i raketno-kosmicheskoi tekhnike* [Principles of Heat Transfer in Aviation and Rocket-and-Space Engineering]. Moscow, Mashinostroenie, 1992. 624 p. (In Russian)
4. Dorrance W.H. *Giperzvukovye techeniya vyazkogo gaza* [Viscous Hypersonic Flow]. Moscow, Mir, 1966. 440 p. (In Russian)
5. Bodryshev V.V., Rabinskiy L.N., Orekhov A.A. Analysis of interaction structure of circular laminar jets using digital image processing. *J. Visualization*, 2022, vol. 25, no. 33, pp. 1137–1150. <https://doi.org/10.1007/s12650-022-00851-w>.

6. Orekhov A., Rabinskiy L., Fedotenkov G. Analytical model of heating an isotropic half-space by a moving laser source with a Gaussian distribution. *Symmetry*, 2022, vol. 14, no. 4, art. 650. <https://doi.org/10.3390/sym14040650>.
7. Fedotenkov G., Rabinskiy L., Lurie S. Conductive heat transfer in materials under intense heat flows. *Symmetry*, 2022, vol. 14, no. 9, art. 1950. <https://doi.org/10.3390/sym14091950>.
8. Dobryanskiy V.N., Fedotenkov G.V., Orekhov A.A., Rabinskiy L.N. Estimation of finite heat distribution rate in the process of intensive heating of solids. *Lobachevskii J. Math.*, 2022, vol. 43, no. 7, pp. 1832–1841. <https://doi.org/10.1134/S1995080222100079>.
9. Orekhov A.A., Rabinskiy L.N., Fedotenkov G.V., Hein T.Z. Heating of a half-space by a moving thermal laser pulse source. *Lobachevskii J. Math.*, 2021, vol. 42, no. 8, pp. 1912–1919. <https://doi.org/10.1134/S1995080221080229>.
10. Formalev V.F., Kolesnik S.A., Kuznetsova E.L. Heat and mass transfer on the side surfaces of blunt nose parts of hypersonic aircraft. *High Temp.*, 2022, vol. 60, suppl. 2, pp. S288–S291. <https://doi.org/10.1134/S0018151X21050060>.
11. Astapov A.N., Zhavoronok S.I., Kurbatov A.S., Rabinskiy L.N., Tushavina O.V. Main problems in the creation of thermal-protection systems based on structurally heterogeneous materials and the methods of their solution. *High Temp.*, 2021, vol. 59, nos. 2–6, pp. 346–372. <https://doi.org/10.1134/S0018151X21020012>.
12. Formalev V.F., Garibyan B.A., Orekhov A.A. Mathematical modeling of heat transfer in anisotropic half-space based on the generalized parabolic wave heat transfer equation. *Lobachevskii J. Math.*, 2022, vol. 43, no. 7, pp. 1842–1849. <https://doi.org/10.1134/S1995080222100110>.
13. Arzhanikov N.S., Sadekova G.S. *Aerodinamika bol'shikh skorostei* [High Speed Aerodynamics]. Moscow, Vyssh. Shk., 1965. 559 p. (In Russian)
14. Polezhaev Yu.V., Yurevich F.B. *Teplovaya zashchita* [Heat Shield]. Moscow, Energiya, 1976. 392 p. (In Russian)
15. Schlichting H. *Teoriya pogranichnogo sloya* [Boundary-Layer Theory]. Moscow, Nauka, 1969. 391 p. (In Russian)

⟨ **Для цитирования:** Тушавина О.В., Егорова М.С. Задачи тепломассопереноса в химически реагирующих пограничных слоях на затупленных телах // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. 2023. Т. 165, кн. 3. С. 294–306. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.294-306>. ⟩

⟨ **For citation:** Tushavina O.V., Egorova M.S. Problems of heat and mass transfer in chemically reacting boundary layers on blunted bodies. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2023, vol. 165, no. 3, pp. 294–306. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.294-306>. (In Russian) ⟩

ОРИГИНАЛЬНАЯ СТАТЬЯ

УДК 53.044, 544.034.24

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.307-321

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОКИСЛЕНИЯ ИНТЕРМЕТАЛЛИДОВ TiAl И Ti_3Al ВСЛЕДСТВИЕ ЗЕРНОГРАНИЧНОЙ ДИФФУЗИИ КИСЛОРОДА

М. В. Чепак-Гизбрехт, А. Г. Князева

Сибирское отделение Российской академии наук, г. Томск, 634021, Россия

Аннотация

Предложена диффузионно-кинетическая модель для анализа процесса окисления в наноструктурированном материале с явным выделением границ зерен. Предполагается, что скорость миграции кислорода вдоль границ превышает скорость его перемещения в объеме зерен. Учтены стадии разложения и образования интерметаллидов и образования оксидов, как в границах, так и в объеме зерен. Задача решена численно. Проведено сравнение динамики окисления для разных материалов с разными свойствами зерен.

Ключевые слова: зернограничная диффузия, окисление, математическое моделирование, интерметаллиды

Введение

Интерметаллидные сплавы TiAl и Ti_3Al перспективны для изготовления деталей двигателей [1]. Однако их применение ограничено из-за коррозионного охрупчивания вследствие окисления при высоких температурах [2]. Технологии изготовления TiAl сплавов таковы, что приводят к формированию нанокристаллической структуры [1, 3]. Таким образом, диффузия кислорода по границам зерен может как приводить к упрочнению [4], так и быть причиной ускоренного высокотемпературного окисления TiAl сплавов с формированием хрупких фаз [2].

Чаще других для моделирования зернограничной диффузии используют модель изолированной границы [5]. Она удобна тем, что допускает приближенное аналитическое решение, которое позволяет оценивать произведение трех величин: коэффициента сегрегации, толщины границ и коэффициента зернограничной диффузии из экспериментально полученных профилей распределения концентрации. Однако для получения аналитического решения Фишер использовал ряд допущений, которые ограничивают применение этого решения для исследования зернограничной диффузии в материалах с долей граничной фазы более 0.2. Численные решения задачи с подобной формулировкой имеют меньше ограничений. Харрисон выделил три кинетических режима, для которых подходит такая формулировка задачи, чтобы ее можно было сопоставить с экспериментом для специального типа границ [6, 7]. Более полную картину при исследовании материалов с высокой долей пересекающихся границ позволяют получить двумерные и трехмерные модели, в которых выделены отдельные зерна или агломераты. Зерна могут быть квадратной [7–11] или произвольной форм, сгенерированные случайно [12] или заданные на основе карты фотографии специально подготовленной поверхности

реального образца [13]. Численные решения получают с использованием конечно-разностных методов [9–11, 14], метода Монте-Карло [8], метода фазового поля [15] и молекулярно-динамических методов [16–20]. Подобные модели используют для исследования наводороживания и коррозии в конструкционных сплавах [12, 20].

В настоящей работе для решения двумерной диффузионно-кинетической задачи с явным учетом границ зерен и их тройных стыков использованы разностные методы. В отличие от предыдущих публикаций [21, 22], цель работы состоит в том, чтобы продемонстрировать различие в динамике окисления интерметаллидов разного состава.

1. Постановка задачи

Исследование начальной стадии окисления будем осуществлять с использованием двумерной диффузионно-кинетической модели с явным учетом границ зерен и стыков на примере сплава TiAl. Положим, что на внешней поверхности TiAl сплава имеется постоянный источник атомарного кислорода, который проникает в материал вдоль границ и по зернам с разной скоростью. Положим, что сплав окисляется при заданной постоянной температуре. Структуру образца представим упорядоченным расположением зерен с фазами разного состава 1 и 2 (рис. 1а). В фазах зерен 1 и 2 и в граничной фазе диффузионные и кинетические параметры могут значительно различаться. Элемент расчетной области вблизи внешней поверхности с источником кислорода имеет вид, как на рис. 1б. При моделировании этот элемент может повторяться вдоль оси x несколько раз, а вдоль оси y имеет постоянно заданную структуру из двух зерен с прилегающими границами. В частном случае для одинакового фазового состава зерен [21] расчетную область вдоль оси Oy можно уменьшить (рис. 1в) в силу симметрии.

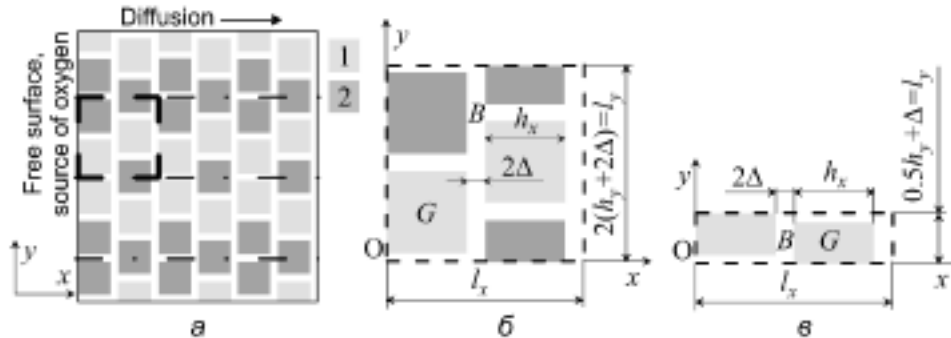


Рис. 1. а) Структура расположения зерен (G) и границ (B) при моделировании и б) соответствующая ей расчетная область (выделена пунктирной линией). в) Расчетная область в задаче с одинаковым фазовым составом зерен 1 и 2. h_x и h_y – размеры зерна вдоль осей x и y соответственно, 2Δ – расстояние между соседними зернами, l_x и l_y – размеры расчетной области вдоль осей x и y соответственно

Диффузия кислорода может быть описана уравнением

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left[D \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[D \frac{\partial C}{\partial y} \right] - W, \quad (1)$$

где C – концентрация (массовая доля) атомарного кислорода в титане, D – коэффициент диффузии, W – сток компонента за счет химических реакций, t – время. На поверхности имеется постоянный источник кислорода

$$x = 0 : \quad C = C_0. \quad (2)$$

Вдали от поверхности источники стоки отсутствуют

$$x \rightarrow \infty : \quad \frac{\partial C}{\partial x} = 0. \quad (3)$$

На всех внутренних границах между фазой зерна и граничной фазой имеется идеальный контакт, которому соответствует равенство химических потенциалов. Для упрощения модели положим, что подвижности кислорода в фазах границ и зерна одинаковы, так что на межфазных границах имеем условия равенства концентрации и потоков

$$\begin{aligned} D^{G1} \frac{\partial C^{G1}}{\partial n} \Big|_{\Gamma} &= D^B \frac{\partial C^B}{\partial n} \Big|_{\Gamma}, \quad C^{G1} = C^B, \\ D^{G2} \frac{\partial C^{G2}}{\partial n} \Big|_{\Gamma} &= D^B \frac{\partial C^B}{\partial n} \Big|_{\Gamma}, \quad C^{G2} = C^B. \end{aligned} \quad (4)$$

Вдоль оси y структура образца симметрична

$$y = 0; y = l_x : \quad \frac{\partial C}{\partial y} = 0. \quad (5)$$

В начальный момент времени кислород в материале отсутствует

$$t = 0 : \quad C = 0. \quad (6)$$

Исходя из данных, найденных в литературе [2, 23–27], наиболее вероятными химическими реакциями в TiAl считаем разложение и образование интерметаллида, окисление титана с образованием монооксида и диоксида, окисление алюминия. Таким образом, имеем систему последовательных и параллельных химических реакций, следствием которых является изменение состава. В случае сплава Ti_3Al сначала происходит разложение Ti_3Al на титан и TiAl, затем происходит разложение TiAl на титан и алюминий и окисление титана и алюминия.

Для записи кинетических уравнений введем следующие обозначения для концентраций реагентов и продуктов: $[\text{O}] = C$, $[\text{Ti}] = C_1$, $[\text{TiO}] = C_2$, $[\text{TiO}_2] = C_3$, $[\text{Al}] = C_4$, $[\text{Al}_2\text{O}_3] = C_5$, $[\text{TiAl}] = C_6$. Положим, что скорости реакций зависят от концентраций по закону действующих масс, т. е. пропорциональны произведениям концентраций реагентов в степенях, равных стехиометрическим коэффициентам соответствующих реакций. Возможные реакции и их скорости w_j выписаны в таблице 1, где k_j – константа скорости химической реакции, j – номер реакции.

Учитывая, что кислород тратится на реакции окисления в реакциях (III)–(V), последнее слагаемое в уравнении (1) запишем в виде

$$W = w_{III} + w_{IV} + 3w_V. \quad (7)$$

Кинетические уравнения для “неподвижных” компонентов представлены в таблице 2.

В начальный момент времени концентрация TiAl во всем образце одинакова $t = 0$: $C_6 = 1$, а продукты реакций отсутствуют:

$$t = 0 : \quad C_1 = C_2 = C_3 = C_4 = C_5 = 0. \quad (8)$$

Масса сохраняется, так что

$$C + C_1 + C_2 + C_3 + C_4 + C_5 + C_6 = 1. \quad (9)$$

Табл. 1

Химические реакции и их скорости

j	Реакция	Скорость реакции
(I)	$\text{TiAl} = \text{Ti} + \text{Al}$	$w_I = k_I C_6$
(II)	$\text{Ti} + \text{Al} = \text{TiAl}$	$w_{II} = k_{II} C_1 C_4$
(III)	$\text{Ti} + \text{O} = \text{TiO}$	$w_{III} = k_{III} C C_1$
(IV)	$\text{TiO} + \text{O} = \text{TiO}_2$	$w_{IV} = k_{IV} C C_2$
(V)	$2\text{Al} + 3\text{O} = \text{Al}_2\text{O}_3$	$w_V = k_V C_4^2 C^3$

Табл. 2

Кинетические уравнения компонентов

n	Компонент	Обозначение	Кинетическое уравнение
1	[Ti]	C_1	$dC_1/dt = w_I - w_{II} - w_{III}$
2	[TiO]	C_2	$dC_2/dt = w_{III} - w_{IV}$
3	[TiO ₂]	C_3	$dC_3/dt = w_{IV}$
4	[Al]	C_4	$dC_4/dt = w_I - w_{II} - 2w_V$
5	[Al ₂ O ₃]	C_5	$dC_5/dt = w_V$
6	[TiAl]	C_6	$dC_6/dt = w_{II} - w_I$

2. Безразмерные переменные

В безразмерных переменных

$$\tau = t/t_*, \quad \xi = x/\Delta, \quad \zeta = y/\Delta,$$

где $t_* = \Delta^2/D^{G1}$, размеры расчетной области $L_\xi = l_x/\Delta$, $L_\zeta = l_y/\Delta$, размеры зерен — h_ξ и h_ζ , кратчайшее расстояние между ближайшими соседними зернами равно 2, а задача (1)–(6), (8) с учетом кинетических уравнений таблицы 2 для окисления TiAl примет вид

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\bar{D}^i \frac{\partial C}{\partial \xi} \right] + \frac{\partial}{\partial \zeta} \left[\bar{D}^i \frac{\partial C}{\partial \zeta} \right] - \bar{W}; \quad (10)$$

$$\xi = 0: \quad C = C_0; \quad (11)$$

$$\xi \rightarrow \infty: \quad \frac{\partial C}{\partial \xi} = 0;$$

$$\bar{D}^{G1} \frac{\partial C^{G1}}{\partial n} \Big|_\Gamma = \bar{D}^B \frac{\partial C^B}{\partial n} \Big|_\Gamma; \quad C^{G1} = C^B;$$

$$\bar{D}^{G2} \frac{\partial C^{G2}}{\partial n} \Big|_\Gamma = \bar{D}^B \frac{\partial C^B}{\partial n} \Big|_\Gamma; \quad C^{G2} = C^B;$$

$$\zeta = 0, \quad \zeta = L_\zeta: \quad \frac{\partial C}{\partial \zeta} = 0;$$

$$\tau = 0: \quad C = 0;$$

$$\bar{W} = w_{III} + w_{IV} + 3w_V;$$

$$\frac{dC_2}{d\tau} = w_{III} - w_{IV}; \quad \frac{dC_3}{d\tau} = w_{IV}; \quad \frac{dC_4}{d\tau} = w_I - w_{II} - 2w_V; \quad \frac{dC_5}{d\tau} = w_V; \quad (12)$$

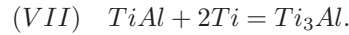
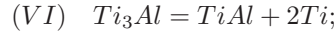
$$\frac{dC_1}{d\tau} = w_I - w_{II} - w_{III}; \quad \frac{dC_6}{d\tau} = w_{II} - w_I; \quad (13)$$

$$\tau = 0: \quad C_1 = C_2 = C_3 = C_4 = C_5 = 0; \quad C_6 = 1. \quad (14)$$

Здесь

$$\omega_I = K_I C_6; \quad \omega_{II} = K_{II} C_1 C_4; \quad \omega_{III} = K_{III} C C_1; \quad \omega_{IV} = K_{IV} C C_2; \quad \omega_V = K_V C_4^2 C^3.$$

Если зерна состоят из Ti_3Al , то помимо реакций (I), (II), (III), (IV) и (V) протекают реакции [23, 27]



Примем, что $[\text{Ti}_3\text{Al}] = C_7$. Иные концентрации имеют прежние обозначения. Тогда соответствующие реакциям разложения и образования Ti_3Al скорости примут вид

$$\omega_{VI} = K_{VI} C_7; \quad \omega_{VII} = K_{VII} C_6 C_1^2.$$

С учетом новых стадий изменятся кинетические уравнения (13) для Ti и TiAl:

$$\frac{dC_1}{d\tau} = \omega_I + 2\omega_{VI} - \omega_{III} - \omega_{II} - 2\omega_{VII}; \quad \frac{dC_6}{d\tau} = \omega_{II} - \omega_I + \omega_{VI} - \omega_{VII}; \quad (15)$$

и добавится кинетическое уравнение для Ti_3Al

$$\frac{dC_7}{d\tau} = \omega_{VII} - \omega_{VI}. \quad (16)$$

Кинетические уравнения для оксидов титана, алюминия и оксида алюминия останутся в прежнем виде (12), поэтому слагаемое $\bar{W}$ в уравнении диффузии (10) также имеет прежний вид. В результате диффузионно-кинетическая задача об окислении Ti_3Al включает уравнения (10)–(12), (15), (16) и условия, аналогичные предыдущим. В начальный момент времени концентрация Ti_3Al во всем образце одинакова $\tau = 0$: $C_7 = 1$, а продукты реакций отсутствуют:

$$\tau = 0: \quad C_1 = C_2 = C_3 = C_4 = C_5 = C_6 = 0.$$

В баланс массы включены семь концентраций

$$C + C_1 + C_2 + C_3 + C_4 + C_5 + C_6 + C_7 = 1.$$

В задачах об окислении TiAl и Ti_3Al содержатся следующие безразмерные параметры:

$$h_\xi = \frac{h_x}{\Delta}; \quad h_\zeta = \frac{h_y}{\Delta}; \quad \bar{D}^i = \frac{D^i}{D^{G1}}; \quad K_j^i = \frac{\Delta^2 k_j^i}{D^{G1}}.$$

В результате решения задачи найдены распределения концентраций во всей расчетной области. Интегральные концентрации отдельных компонентов по всему объему были рассчитаны по формуле

$$J = \frac{1}{S} \int_0^{L_\xi} \int_0^{L_\zeta} C(\xi, \zeta) d\xi d\zeta,$$

где L_ξ – размер расчетной области вдоль оси $O\xi$, L_ζ – размер расчетной области вдоль оси $O\zeta$, C – концентрация соответствующего компонента (O, Ti, TiO, TiO_2 , Al, Al_2O_3 , TiAl, Ti_3Al), $S = L_\xi L_\zeta$ – площадь расчетной области.

3. Метод решения

В частном случае без учета химических превращений диффузионная задача (10), (11) о насыщении материала кислородом для одной границы в полубесконечном образце имеет известное аналитическое решение. Если коэффициенты диффузии в зернах 1 и 2 одинаковы и равны единице, то коэффициент диффузии в граничной фазе от них отличается: $C = C_0 \operatorname{erfc}(\xi / \sqrt{4\bar{D}\tau})$.

Для численного решения уравнений диффузии (10) использована неявная разностная схема расщепления по координатам и метод прогонки. Для аппроксимации внутренних граничных условий использовано разложение концентрации кислорода в соседних с границей точках разностной сетки в ряды Тейлора относительно граничной точки по степеням шага разностной сетки. Для решения кинетических уравнений (12), (13) или (12), (15) и (16) применен алгоритм [29], подобный явному методу Эйлера. При этом организован итерационный процесс на каждом шаге по времени. Итерации продолжаются до тех пор, пока не выполнится условие

$$\sqrt{\sum_{k,l} \left[\sum_{j=1}^n \left(Y_{j,(k,l)}^{i+1} - Y_{j,(k,l)}^i \right)^2 \right]} < \varepsilon,$$

где $Y_{j,(k,l)}^i$ – концентрация компонента j в точке разностной сетки (ξ_k, ζ_l) для итерации i .

Сравнение численного и аналитического решений, когда коэффициенты диффузии во всех фазах равны единице, а размеры зерен равны $h_\zeta = 8$ и $h_\xi = 60$, представлено на рис. 2. Видно, что решения совпадают для любых моментов времени. Распределения накладываются друг на друга для любых точек вдоль оси ζ для одинакового момента времени.

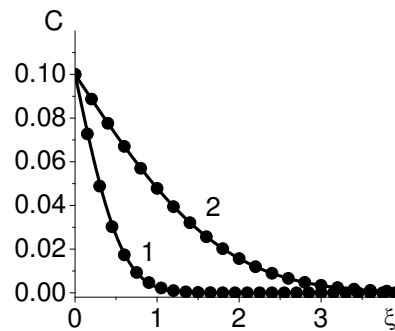


Рис. 2. Распределение концентрации кислорода вдоль оси ξ при $\zeta = h_\zeta + 2$ в последовательные моменты времени 1) $\tau = 0.1$, 2) $\tau = 1$. Шаги по пространству вдоль осей ζ и ξ одинаковы и равны 0.01, шаг по времени 0.01. Сплошные линии – аналитическое решение, символы – численное решение

Когда коэффициенты диффузии в граничной фазе и в зерне отличаются, аналитическое и численное решения близки для малых времен, пока отток диффузанта из граничной фазы в зерно пренебрежимо мал. В таблицах 3 и 4 представлены значения концентрации в одинаковых точках (ξ, ζ) в момент времени $\tau = 0.1$ для следующих параметров: $C_0 = 0.1$, $\bar{D} = 100$, $h_\zeta = 8$, $h_\xi = 50$, шаги по пространству вдоль осей ξ и ζ одинаковы. Распределения накладываются друг на друга для точек с координатами $\zeta = 0$, $\zeta = h_\zeta + 2$, $\zeta = 2(h_\zeta + 2)$ и точек с координатами

$\zeta = 0.5h_\zeta + 1$, $\zeta = 3(0.5h_\zeta + 1)$ в одинаковые моменты времени. Из таблиц 3 и 4 видно, что в фазе зерна аналитическое и численное решения совпадают с точностью до пятого знака после запятой и до второго знака после запятой для граничной фазы к моменту времени $\tau = 0.1$. При этом уменьшение шага по времени влияет на точность более существенно, чем уменьшение пространственного шага.

Табл. 3

Значения концентрации в граничной фазе в точке (2,0)

Шаги по пространству	0.01	0.01	0.01	0.02	0.1	аналитическое решение
Шаг по времени	0.0001	0.001	0.01	0.01	0.01	
Концентрация	0.05999	0.05972	0.05774	0.05811	0.05782	0.06547

Табл. 4

Значения концентрации в фазе зерна в точке $(0.3, 0.5h_\zeta + 1)$

Шаги по пространству	0.01	0.01	0.01	0.02	0.1	аналитическое решение
Шаг по времени	0.0001	0.001	0.01	0.01	0.01	
Концентрация	0.05022	0.0501	0.04886	0.04886	0.04882	0.05023

На рис. 3 представлено распределение концентрации кислорода и монооксида титана вдоль оси ξ в граничной фазе и зерне в момент времени $\tau = 0.1$ при окислении Ti-Al. Принято: $h_\zeta = 5$, $h_\xi = 5$, $\bar{D}^{G1} = \bar{D}^{G2} = 1$, $\bar{D}^B = 100$, $K_I^{G1} = K_I^{G2} = K_I^B = 0.02$, $K_{II}^{G1} = K_{II}^{G2} = K_{II}^B = 0.005$, $K_{III}^{G1} = K_{III}^{G2} = 1$, $K_{III}^B = 100$, $K_{IV}^{G1} = K_{IV}^{G2} = 2$, $K_{IV}^B = 200$, $K_V^{G1} = K_V^{G2} = 500$, $K_V^B = 5 \cdot 10^4$. Видно, что уменьшение шага по времени с 0.01 до 0.001 (при шаге по пространству 0.01) приводит к повышению точности расчета в областях стыков зерен. Дальнейшее уменьшение шага по времени до 0.0001 на количество итераций и точность существенно не влияет. Для достижения точности 0.001 с шагом по времени 0.001 потребовалось две итерации. В случае, когда коэффициенты диффузии в зернах 1 и 2 одинаковы и равны единице, но отличаются от коэффициента диффузии в граничной фазе, численные решения задач (рис. 1 б и в) совпадают как при отсутствии химических реакций, так и при их наличии.

4. Динамика окисления сплава разного состава

Оценка безразмерных параметров для решения диффузионно-кинетической задачи об окислении TiAl и Ti₃Al была проведена в работах [21, 22]. На основе этих данных для расчетов мы приняли следующие параметры: $h_\zeta = 5$, $h_\xi = 5$, $C_0 = 0.1$, коэффициенты диффузии в разных зернах и граничной фазе отличаются $\bar{D}^{G1} = 1$, $\bar{D}^{G2} = 10$, $\bar{D}^B = 100$, параметры реакций в зернах 1 и 2 и граничной фазе одинаковы (верхний индекс опущен), $K_I = 0.02$, $K_{II} = 0.005$, $K_{III} = 100$, $K_{IV} = 200$, $K_V = 5 \cdot 10^4$, $K_{VI} = 0.05$, $K_{VII} = 0.0025$. Учитываем, что скорости одинаковых реакций (I)–(V) при разложении и окислении Ti₃Al и TiAl равны.

Пример двумерного распределения концентрации кислорода и оксидов в момент времени $\tau = 5$ при окислении TiAl и Ti₃Al представлен на рис. 4. За счет различия коэффициентов диффузии в зернах 1 и 2 и граничной фазе двумерное распределение кислорода и оксидов в TiAl и Ti₃Al имеет локальные максимумы и

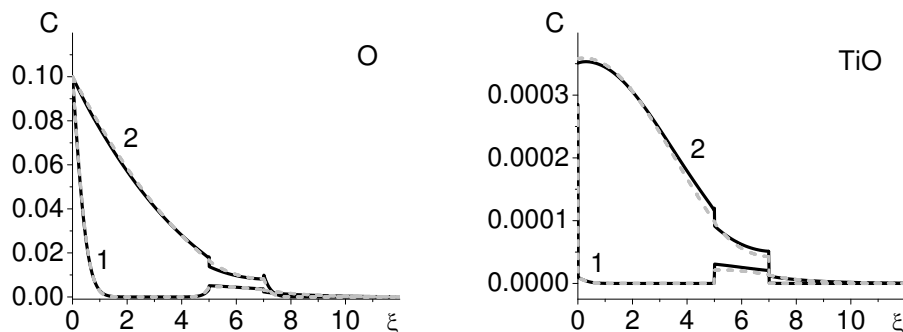


Рис. 3. Распределение концентрации кислорода и монооксида титана вдоль оси ξ 1) в граничной фазе при $\zeta = 0$, 2) в зерне при $\zeta = 0.5h\zeta + 1$. Сплошные линии – шаг по времени 0.01, пунктирные линии – шаг по времени 0.001

минимумы вдоль оси ζ . Видно, что в обоих случаях наблюдается смещение максимума монооксида титана в глубину вдоль оси ξ (самая темная область между $\xi = 0$ и $\xi = 20$) за счет последовательно протекающих реакций окисления титана и монооксида титана. При окислении Ti_3Al концентрации оксидов титана выше, а оксида алюминия ниже, и их области распределения вдоль оси ξ меньше, чем при окислении TiAl .

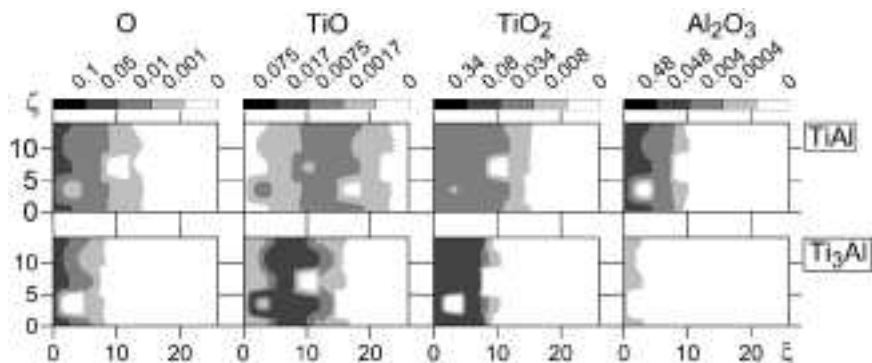


Рис. 4. Двумерное распределение концентраций в момент времени $\tau = 5$ при окислении TiAl и Ti_3Al

Динамику накопления оксидов удобно наблюдать на примере интегральных концентраций. На рис. 5 представлены зависимости от времени интегральных концентраций кислорода и оксидов. Очевидно, что при разложении Ti_3Al получается в три раза больше титана и в два раза меньше алюминия, чем при разложении TiAl . Поэтому при окислении Ti_3Al на активное окисление титана кислорода тратится больше, оксид алюминия практически не образуется. Эти данные косвенно согласуются с динамикой окисления сплавов, получаемых из смесей титан-алюминиевых порошков в различных технологиях порошковой металлургии [27, 29]. И в том, и в другом случаях наблюдается максимум в зависимости от времени интегральной концентрации кислорода, который связан с тем, что на начальном этапе к моменту времени $\tau = 0.5$ для Ti_3Al и $\tau = 1$ для TiAl накапливается достаточное количество кислорода, титана и алюминия для активации окислительных реакций. После этого периода начинается этап постепенного накопления оксидов, когда поступающий

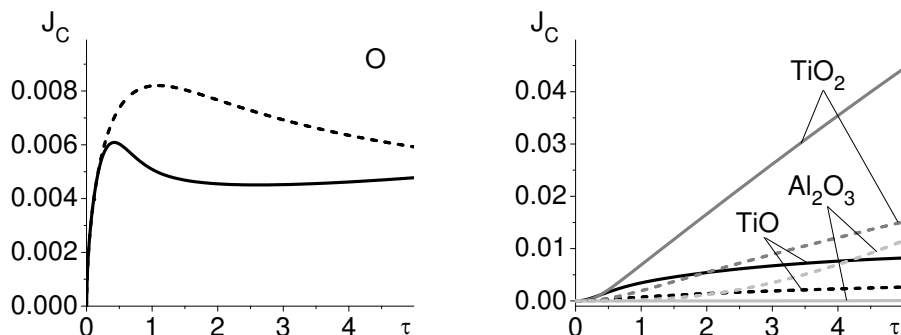


Рис. 5. Зависимость от времени интегральной концентрации кислорода и оксидов для разных материалов: сплошные линии – Ti_3Al , пунктирные линии – $TiAl$

посредством диффузии кислород проходит преимущественно вдоль границ зерен и частично расходуется на окисление.

На рис. 4 и 5 представлен начальный процесс окисления, однако если наблюдать за процессом более длительное время, то при определенном соотношении констант реакций можно выявить максимум в зависимости от времени интегральной концентрации TiO , связанный с превращением TiO в более стабильный TiO_2 . Эти данные косвенно согласуются с термодинамическими оценками [2, 25] и экспериментальными данными [26].

5. Заключение

Таким образом, в работе представлена двумерная диффузионно-кинетическая модель для исследования окисления сплавов $TiAl$ и Ti_3Al . На примере распределения концентрации кислорода и монооксида титана вдоль одной из осей продемонстрирована точность численного решения. При сравнении динамики окисления $TiAl$ и Ti_3Al показано, что разные коэффициенты диффузии в зернах 1 и 2 и граничной фазе приводят к появлению локальных неоднородностей в распределении кислорода и оксидов вдоль оси ζ . Вдоль оси ξ распределение монооксида титана имеет область максимальных концентраций на некотором расстоянии от поверхности с источником кислорода, что связано с последовательно протекающими реакциями окисления титана и монооксида титана. При сравнении динамики накопления концентраций кислорода и оксидов для одинаковых диффузионных и кинетических параметров в ходе окисления $TiAl$ и Ti_3Al обнаружено, что при окислении Ti_3Al кислород интенсивнее расходуется на окисление титана и монооксида титана, при этом оксид алюминия образуется существенно медленнее, чем при окислении $TiAl$, что согласуется с литературными данными.

Благодарности. Работа выполнена в рамках государственного задания ИФПМ СО РАН, тема номер FWRW-2022-0003.

Литература

1. Swadźba R., Marugi K., Pyclik J. STEM investigations of γ -TiAl produced by additive manufacturing after isothermal oxidation // Corros. Sci. 2020. V. 169. Art. 108617. <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2020.108617>.
2. Dai J., Zhu J., Chen C., Weng F. High temperature oxidation behavior and research status of modifications on improving high temperature oxidation resistance of titanium alloys and titanium aluminides: A review // J. Alloys Compd. 2016. V. 685. P. 784–798. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2016.06.212>.
3. Колубаев Е.А., Рыбцов В.Е., Чумаевский А.В., Астафурова Е.Г. Научные подходы к микро-, мезо- и макроструктурному дизайну объемных металлических и полиметаллических материалов с использованием метода электронно-лучевого аддитивного производства // Физ. мезомехан. 2022. Т. 25, № 4. С. 5–18. https://doi.org/10.55652/1683-805X_2022_25_4_5.
4. Lim H.P., Liew W.Y.H., Melvin G.J.H., Jiang Z.-T. A short review on the phase structures, oxidation kinetics, and mechanical properties of complex Ti-Al alloys // Materials. 2021. V. 14, No 7. Art. 1677. <https://doi.org/10.3390/ma14071677>.
5. Fisher J.C. Calculation of diffusion penetration curves for surface and grain boundary diffusion // J. Appl. Phys. 1951. V. 22, No 1. P. 74–77. <https://doi.org/10.1063/1.1699825>.
6. Kaur I., Gust W. Fundamentals of Grain and Interphase Boundary Diffusion. Stuttgart: Ziegler Press, 1989. 422 p.
7. Herzig C., Divinski S.V. Grain boundary diffusion in metals: Recent developments // Mater. Trans. 2003. V. 44, No 1. P. 14–27. <https://doi.org/10.2320/matertrans.44.14>.
8. Belova I.V., Murch G.E. Diffusion in nanocrystalline materials // J. Phys. Chem. Solids. 2003. V. 64, No 5. P. 873–878. [https://doi.org/10.1016/S0022-3697\(02\)00421-3](https://doi.org/10.1016/S0022-3697(02)00421-3).
9. Knyazeva A., Kryukova O., Maslov A. Two-level model of the grain boundary diffusion under electron beam action // Comput. Mater. Sci. 2021. V. 196. Art. 110548. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110548>.
10. Gryaznov D., Fleig J., Maier J. Finite element simulation of diffusion into polycrystalline materials // Solid State Sci. 2008. V. 10, No 6. P. 754–760. <https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2008.03.030>.
11. Jaseliunaite J., Galdikas A. Kinetic modeling of grain boundary diffusion: The influence of grain size and surface processes // Materials. 2020. V. 13, No 5. Art. 1051. <https://doi.org/10.3390/ma13051051>.
12. Díaz A., Cuesta I.I., Martínez-Pañeda E., Alegre J.M. Analysis of hydrogen permeation tests considering two different modelling approaches for grain boundary trapping in iron // Int. J. Fract. 2020. V. 223, No 1–2. P. 17–35. <https://doi.org/10.1007/s10704-019-00411-8>.
13. Jaseliunaite J., Povilaitis M., Galdikas A. Kinetic modeling of grain boundary diffusion: Typical, bi-modal, and semi-lamellar polycrystalline coating morphologies // Coatings. 2022. V. 12, No 7. Art. 992. <https://doi.org/10.3390/coatings12070992>.
14. Hamm M., Pundt A. FEM simulation supported evaluation of a hydrogen grain boundary diffusion coefficient in MgH₂ // Int. J. Hydrogen Energy. 2017. V. 42, No 35. P. 22530–22537. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.05.050>.
15. Svoboda J., Stopka J., Fisher F.D. Two-dimensional simulation of reactive diffusion in binary systems // Comput. Mater. Sci. 2014. V. 95. P. 309–315. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.07.041>.
16. Bhatia M.A., Zhang X., Azarnoush M., Lu G., Solanki K.N. Effects of oxygen on prismatic faults in α -Ti: A combined quantum mechanics/molecular mechanics study // Scripta Mater. 2015. V. 98. P. 32–35. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2014.11.008>.

17. *Chen X., Huang L., Jiao Y., Wang S., An Q., Bao Y., Geng L.* Mechanisms of oxidation anisotropy between α -Ti (0001) and (011 $\bar{0}$) crystallographic planes in titanium matrix composites // *Mater. Lett.* 2021. V. 286. Art. 129230. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2020.129230>.
18. *Bokstein B., Rodin A., Itckovitch A., Klinger L.* Segregation and phase transitions in grain boundaries // *Diffus. Found.* 2019. V. 22, P. 160–169. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DF.22.160>.
19. *Poletaev G.M.* Self-diffusion in liquid and solid alloys of the Ti-Al system: Molecular dynamics simulation // *J. Exp. Theor. Phys.* 2021. V. 133, No 4. P. 455–460. <https://doi.org/10.1134/S1063776121090041>.
20. *Rakitin M.S., Mirzoev A.A., Mirzaev D.A.* First-principles and thermodynamic simulation of elastic stress effect on energy of hydrogen dissolution in alpha iron // *Russ. Phys. J.* 2018. V. 60, No 12. P. 2136–2143. <https://doi.org/10.1007/s11182-018-1337-2>.
21. *Chepak-Gizbrekht M.V., Knyazeva A.G.* Oxidation of TiAl alloy by oxygen grain boundary diffusion // *Intermetallics.* 2023. V. 162. Art. 107993. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2023.107993>.
22. *Chepak-Gizbrekht M.V., Knyazeva A.G.* Grain boundary diffusion effect on Ti₃Al alloy oxidation // *Russ. Phys. J.* 2022. V. 65, No 7. P. 1130–1137. <https://doi.org/10.1007/s11182-022-02741-y>.
23. *Mishin Y., Herzig Chr.* Diffusion in the Ti–Al system // *Acta Mater.* 2000. V. 48, No 3. P. 589–623. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(99\)00400-0](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(99)00400-0).
24. *Das S.* The Al–O–Ti (Aluminum–oxygen–titanium) system // *J. Phase Equilib.* 2002. V. 23, No 6. P. 525–536. <https://doi.org/10.1361/105497102770331271>.
25. *Datta P.K., Du H.L., Burnell-Gray J.S., Ricker R.* Corrosion of intermetallics // *ASM Handbook.* V. 13B: Corrosion: Materials. Cramer S.D., Covino, B.S., Jr. (Eds.). ASM Intl., OH: Materials Park, 2005. P. 490–512. <https://doi.org/10.31399/asm.hb.v13b.9781627081832>.
26. *Jing Y., Lingyan K., Xinyu C., Yongshan T., Tiefan L., Tianying X.* Improvement in the oxidation resistance of TiAl based alloy by cold spraying Al coating and subsequent interdiffusion treatment // *Персп. матер.* 2011. № S13. С. 295–300.
27. *Гарун Ё., Оздемир О.* Изучение термоциклического окисления двухфазных электро-спеченных титаналюминиевых сплавов с добавками хрома, молибдена и кремния // *Физ. метал. и металловед.* 2020. Т. 121, № 1. С. 365–373. <https://doi.org/10.31857/S001532302004004X>.
28. *Demidov V.N., Knyazeva A.G.* Multistage kinetics of the synthesis of Ti–T_xCi_y composite // *Nanosci. Technol. Int. J.* 2019. V. 10, No 3. P. 195–218. <https://doi.org/10.1615/NanoSciTechnolIntJ.2019031220>.
29. *Cobbinah P.V., Matizamhuka W.R.* Solid-state processing route, mechanical behaviour, and oxidation resistance of TiAl alloys // *Adv. Mater. Sci. Eng.* 2019. V. 2019. Art. 4251953. <https://doi.org/10.1155/2019/4251953>.

Поступила в редакцию 25.08.2023
Принята к публикации 30.09.2023

Чепак-Гизбрехт Мария Владимировна, кандидат физико-математических наук, научный сотрудник лаборатории нелинейной механики метаматериалов и многоуровневых систем Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ИФПМ СО РАН)

Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ИФПМ СО РАН)

Академический просп., д. 2/4, г. Томск, 634021, Россия

E-mail: *mv2016@mail.ru*

Князева Анна Георгиевна, доктор физико-математических наук, профессор, главный научный сотрудник лаборатории нелинейной механики метаматериалов и многоуровневых систем Института физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ИФПМ СО РАН)

Институт физики прочности и материаловедения Сибирского отделения Российской академии наук (ИФПМ СО РАН)

Академический просп., д. 2/4, г. Томск, 634021, Россия

E-mail: *anna-knyazeva@mail.ru*

ISSN 2541–7746 (Print)

ISSN 2500–2198 (Online)

UCHENYE ZAPISKI KAZANSKOGO UNIVERSITETA.

SERIYA FIZIKO-MATEMATICHESKIE NAUKI

(Proceedings of Kazan University. Physics and Mathematics Series)

2023, vol. 165, no. 3, pp. 307–321

ORIGINAL ARTICLE

doi: 10.26907/2541-7746.2023.3.307-321

Modeling the Oxidation Process of TiAl and Ti₃Al Intermetallic Compounds Due to Grain-Boundary Diffusion of Oxygen

M. V. Chepak-Gizbrekht , A. G. Knyazeva***

Institute of Strength Physics and Materials Science, Siberian Branch,

Russian Academy of Sciences, Tomsk, 634021 Russia

E-mail: **mv2016@mail.ru, **anna-knyazeva@mail.ru*

Received August 25, 2023; Accepted September 30, 2023

Abstract

A diffusion-kinetic model was proposed to analyze the oxidation process in a nanostructured material with explicit identification of grain boundaries. It was assumed that oxygen migrates faster along the boundaries than it does in the grain volume. The model takes into account the stages of decomposition and formation of intermetallic compounds, as well as the formation of oxides, both within the boundaries and in the grain volume. The problem was solved numerically, and the oxidation dynamics were compared for various materials with different grain properties.

Keywords: grain boundary diffusion, oxidation, mathematical modeling, intermetallic compounds

Acknowledgments. This study was performed as part of the state assignment to the Institute of Strength Physics and Materials Science, Siberian Branch, Russian Academy of Sciences (project no. FWRW-2022-0003).

Figure Captions

Fig. 1. *a)* Structural arrangement of the grains (G) and boundaries (B) during modeling and *b)* the corresponding computational domain (dotted line). *c)* Computational domain in the problem with the same phase composition of grains 1 and 2. h_x and h_y – the grain sizes along the x and y axes, respectively, 2Δ – the distance between adjacent grains, l_x and l_y – the dimensions of the computational domain along the x and y axes, respectively.

Fig. 2. Distribution of the oxygen concentration along the ξ axis at $\zeta = h_\zeta + 2$ at successive moments of time 1) $\tau = 0.1$, 2) $\tau = 1$. The spatial steps along the ζ and ξ axes are the same and equal to 0.01, the time step is 0.01. Solid lines – the analytical solution, symbols – the numerical solution.

Fig. 3. Distribution of the oxygen and titanium monoxide concentrations along the ξ axis 1) in the boundary phase at $\zeta = 0$, 2) in the grain at $\zeta = 0.5h_\zeta + 1$. Solid lines – the time step of 0.01, dotted lines – the time step of 0.001.

Fig. 4. Two-dimensional distribution of the concentrations at time $\tau = 5$ during the oxidation of TiAl and Ti₃Al.

Fig. 5. Dependence of the integral concentration of oxygen and oxides on time for different materials: solid lines – Ti₃Al, dotted lines – TiAl.

References

1. Swadźba R., Marugi K., Pyclik J. STEM investigations of γ -TiAl produced by additive manufacturing after isothermal oxidation. *Corros. Sci.*, 2020, vol. 169, art. 108617. <https://doi.org/10.1016/j.corsci.2020.108617>.
2. Dai J., Zhu J., Chen C., Weng F. High temperature oxidation behavior and research status of modifications on improving high temperature oxidation resistance of titanium alloys and titanium aluminides: A review. *J. Alloys Compd.*, 2016, vol. 685, pp. 784–798. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2016.06.212>.
3. Kolubaev E.A., Rubtsov V.E., Chumaevsky A.V., Astafurova E.G. Micro-, meso- and macrostructural design of bulk metallic and polycrystalline materials by wire-feed electron-beam additive manufacturing. *Phys. Mesomech.*, 2022, vol. 25, no. 4, pp. 479–491. <https://doi.org/10.1134/S1029959922060017>.
4. Lim H.P., Liew W.Y.H., Melvin G.J.H., Jiang Z.-T. A short review on the phase structures, oxidation kinetics, and mechanical properties of complex Ti-Al alloys. *Materials*, 2021, vol. 14, no. 7, art. 1677. <https://doi.org/10.3390/ma14071677>.
5. Fisher J.C. Calculation of diffusion penetration curves for surface and grain boundary diffusion. *J. Appl. Phys.*, 1951, vol. 22, no. 1, pp. 74–77. <https://doi.org/10.1063/1.1699825>.
6. Kaur I., Gust W. *Fundamentals of Grain and Interphase Boundary Diffusion*. Stuttgart, Ziegler Press, 1989. 422 p.
7. Herzig C., Divinski S.V. Grain boundary diffusion in metals: Recent developments. *Mater. Trans.*, 2003, vol. 44, no. 1, pp. 14–27. <https://doi.org/10.2320/matertrans.44.14>.
8. Belova I.V., Murch G.E. Diffusion in nanocrystalline materials. *J. Phys. Chem. Solids*, 2003, vol. 64, no. 5, pp. 873–878. [https://doi.org/10.1016/S0022-3697\(02\)00421-3](https://doi.org/10.1016/S0022-3697(02)00421-3).
9. Knyazeva A., Kryukova O., Maslov A. Two-level model of the grain boundary diffusion under electron beam action. *Comput. Mater. Sci.*, 2021, vol. 196, art. 110548. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110548>.
10. Gryaznov D., Fleig J., Maier J. Finite element simulation of diffusion into polycrystalline materials. *Solid State Sci.*, 2008, vol. 10, no. 6, pp. 754–760. <https://doi.org/10.1016/j.solidstatesciences.2008.03.030>.

11. Jaseliunaite J., Galdikas A. Kinetic modeling of grain boundary diffusion: The influence of grain size and surface processes. *Materials*, 2020, vol. 13, no. 5, art. 1051. <https://doi.org/10.3390/ma13051051>.
12. Díaz A., Cuesta I.I., Martinez-Pañeda E., Alegre J.M. Analysis of hydrogen permeation tests considering two different modelling approaches for grain boundary trapping in iron. *Int. J. Fract.*, 2020, vol. 223, nos. 1–2, pp. 17–35. <https://doi.org/10.1007/s10704-019-00411-8>.
13. Jaseliunaite J., Povilaitis M., Galdikas A. Kinetic modeling of grain boundary diffusion: Typical, bi-modal, and semi-lamellar polycrystalline coating morphologies. *Coatings*, 2022, vol. 12, no. 7, art. 992. <https://doi.org/10.3390/coatings12070992>.
14. Hamm M., Pundt A. FEM simulation supported evaluation of a hydrogen grain boundary diffusion coefficient in MgH_2 . *Int. J. Hydrogen Energy*, 2017, vol. 42, no. 35, pp. 22530–22537. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2017.05.050>.
15. Svoboda J., Stopka J., Fisher F.D. Two-dimensional simulation of reactive diffusion in binary systems. *Comput. Mater. Sci.*, 2014, vol. 95, pp. 309–315. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2014.07.041>.
16. Bhatia M.A., Zhang X., Azarnoush M., Lu G., Solanki K.N. Effects of oxygen on prismatic faults in α -Ti: A combined quantum mechanics/molecular mechanics study. *Scripta Mater.*, 2015, vol. 98, pp. 32–35. <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2014.11.008>.
17. Chen X., Huang L., Jiao Y., Wang S., An Q., Bao Y., Geng L. Mechanisms of oxidation anisotropy between α -Ti (0001) and (011 $\bar{0}$) crystallographic planes in titanium matrix composites. *Mater. Lett.*, 2021, vol. 286, art. 129230. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2020.129230>.
18. Bokstein B., Rodin A., Itckovitch A., Klinger L. Segregation and phase transitions in grain boundaries. *Diffus. Found.*, 2019, vol. 22, pp. 160–169. <https://doi.org/10.4028/www.scientific.net/DF.22.160>.
19. Poletaev G.M. Self-diffusion in liquid and solid alloys of the Ti-Al system: Molecular dynamics simulation. *J. Exp. Theor. Phys.*, 2021, vol. 133, no. 4, pp. 455–460. <https://doi.org/10.1134/S1063776121090041>.
20. Rakitin M.S., Mirzoev A.A., Mirzaev D.A. First-principles and thermodynamic simulation of elastic stress effect on energy of hydrogen dissolution in alpha iron. *Russ. Phys. J.*, 2018, vol. 60, no. 12, pp. 2136–2143. <https://doi.org/10.1007/s11182-018-1337-2>.
21. Chepak-Gizbrekht M.V., Knyazeva A.G. Oxidation of TiAl alloy by oxygen grain boundary diffusion. *Intermetallics*, 2023, vol. 162, art. 107993. <https://doi.org/10.1016/j.intermet.2023.107993>.
22. Chepak-Gizbrekht M.V., Knyazeva A.G. Grain boundary diffusion effect on Ti_3Al alloy oxidation. *Russ. Phys. J.*, 2022, vol. 65, no. 7, pp. 1130–1137. <https://doi.org/10.1007/s11182-022-02741-y>.
23. Mishin Y., Herzig Chr. Diffusion in the Ti–Al system. *Acta Mater.*, 2000, vol. 48, no. 3, pp. 589–623. [https://doi.org/10.1016/S1359-6454\(99\)00400-0](https://doi.org/10.1016/S1359-6454(99)00400-0).
24. Das S. The Al–O–Ti (Aluminum–oxygen–titanium) system. *J. Phase Equilib.*, 2002, vol. 23, no. 6, pp. 525–536. <https://doi.org/10.1361/105497102770331271>.
25. Datta P.K., Du H.L., Burnell-Gray J.S., Ricker R. Corrosion of intermetallics. In: Cramer S.D., Covino, B.S., Jr. (Eds.) *ASM Handbook*. Vol. 13B: Corrosion: Materials. ASM Intl., OH, Materials Park, 2005, pp. 490–512. <https://doi.org/10.31399/asm.hb.v13b.9781627081832>.

26. Jing Y., Lingyan K., Xinyu C., Yongshan T., Tiefan L., Tianying X. Improvement in the oxidation resistance of TiAl based alloy by cold spraying Al coating and subsequent interdiffusion treatment. *Perspekt. Mater.*, 2011, no. S13, pp. 295–300.
27. Garip Y., Ozdemir O. Study of thermocyclic oxidation of two-phase electrosintered titanium-aluminum alloys with dopant of chromium, molybdenum, and silicon. *Fiz. Met. Metalloved.*, 2020, vol. 121, no. 1, pp. 365–373. doi: 10.31857/S001532302004004X. (In Russian)
28. Demidov V.N., Knyazeva A.G. Multistage kinetics of the synthesis of $Ti-T_xCi_y$ composite. *Nanosci. Technol. Int. J.*, 2019, vol. 10, no. 3, pp. 195–218. <https://doi.org/10.1615/NanoSciTechnolIntJ.2019031220>.
29. Cobbinah P.V., Matizamhuka W.R. Solid-state processing route, mechanical behaviour, and oxidation resistance of TiAl alloys. *Adv. Mater. Sci. Eng.*, 2019, vol. 2019, art. 4251953. <https://doi.org/10.1155/2019/4251953>.

Для цитирования: Чепак-Гизбрехт М.В., Князева А.Г. Моделирование процесса окисления интерметаллидов TiAl и Ti_3Al вследствие зернограницной диффузии кислорода // Учен. зап. Казан. ун-та. Сер. Физ.-матем. науки. 2023. Т. 165, кн. 3. С. 307–321. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.307-321>.

For citation: Chepak-Gizbrekht M.V., Knyazeva A.G. Modeling the oxidation process of TiAl and Ti_3Al intermetallic compounds due to grain-boundary diffusion of oxygen. *Uchenye Zapiski Kazanskogo Universiteta. Seriya Fiziko-Matematicheskie Nauki*, 2023, vol. 165, no. 3, pp. 307–321. URL: <https://doi.org/10.26907/2541-7746.2023.3.307-321>. (In Russian)

Индекс 19423