СОДЕРЖАНИЕ

Том 8, номер 6, 2019

ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА

Contents

Volume 8, Number 6, 2019

Vestnik Natsional’nogo Issledovatel’skogo Yadernogo Universiteta “MIFI”

Applied Mathematics and Informatics

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА “МИФИ”, 2019, том 8, № 6, с. 491–497

УДК 533.9.07

СТАТУС РАЗРАБОТКИ ТОКАМАКА МИФИСТ

© 2019 г. В. А. Курнаев[1], В. Е. Николаева[1,*], Г. М. Воробьев[1], Ю. М. Гаспарян[1], Д. П. Иванов[1,2], С. А. Крат[1,2], А. В. Мельников[1,2]

[1] *Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409, Россия*

[2] *Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, 123098, Россия*

**e-mail: venikolaeva@mephi.ru*

Поступила в редакцию 03.08.2019 г.
После доработки 25.09.2019 г.
Принята к публикации 01.10.2019 г.

В институте ЛаПлаз НИЯУ МИФИ ведется разработка и создание компактного сферического токамака МИФИСТ для учебно-демонстрационных и исследовательских целей. Основными задачами являются подготовка кадров в области управляемого термоядерного синтеза для российских установок (Т-15МД, Т11-М и других) и международного реактора ИТЭР, а также решение инновационных задач в области термоядерных технологий. Важной особенностью проекта является максимально возможная цифровизация установки с тем, чтобы обеспечить по возможности, удаленный доступ для студентов других университетов, специализирующихся в области термоядерных технологий с магнитным удержанием плазмы. Данная установка при успешной реализации проекта создания надежно действующего токамака будет использоваться и для решения ряда актуальных научно-технологических задач: ускоренной отработки технологий работы с литием, исследования удержания плазмы в сферическом токамаке, развития высокочастотных (ВЧ) технологий (СВЧ-предыонизации и поддержания тока с помощью ВЧ-волн) и отработки методов *in situ* анализа взаимодействия плазмы с поверхностью. На данный момент осуществлено проектирование учебно-демонстрационного и исследовательского токамака МИФИСТ, разработаны концепции систем диагностик и дополнительного нагрева плазмы, начато изготовление вакуумной камеры и элементов электромагнитной системы.

Ключевые слова: термоядерный синтез, магнитное удержание плазмы, токамак, плазма

DOI: 10.1134/S2304487X19060087

ВВЕДЕНИЕ

Участие РФ в создании международного термоядерного реактора ИТЭР предполагает не только выполнение нашей страной взятых на себя обязательств по поставкам, но и подготовку высококвалифицированных кадров, а также проведение исследований, помогающих оптимизировать и улучшить показатели эффективности экспериментов для токамака-реактора ИТЭР в качестве инструмента для доказательства реализуемости и экономической целесообразности развития управляемого термоядерного синтеза в установках с магнитным удержанием.

Сферическая конфигурация токамака рассматривается как одна из наиболее перспективных для осуществления реакции ядерного синтеза в источнике быстрых нейтронов. По сравнению с традиционными токамаками сферический токамак характеризуется меньшим аспектным отношением (отношением большого радиуса к малому) и возможностью получить высокое давление плазмы при относительно небольшой величине тороидального магнитного поля, что определяет экономическую эффективность работы реактора [1–6]. Кроме того, из-за большего отношения давления плазмы к давлению магнитного поля, а также высокой треугольности и вытянутости плазмы, плазма в сферическом токамаке устойчивее к воздействию магнитогидродинамических неустойчивостей, а значит, стабильнее [7]. Механизм устойчивого удержания плазмы является одним из самых важных вопросов на пути к эффективной реакции термоядерного синтеза. Для лучшего понимания механизма удержания плазмы и предсказания параметров плазмы для прототипов термоядерных реакторов, таких как ITER и DEMO, используются скейлинги, полученные на основе экспериментальных данных существующих токамаков [8]. Результаты экспериментов на небольшом сферическом токамаке необходимы для дополнения и уточнения существующих скейлингов, учитывающих в основном данные традиционных токамаков.

К настоящему времени технологии УТС на базе токамаков, в том числе и сферических, широко развиваются во всем мире. Однако ряд проблем, таких как проблема первой стенки и стационарное поддержание тока, еще ждут своего технологического решения. Использование обращенных к плазме элементов на основе жидкого лития в термоядерных установках имеет много преимуществ, таких как возобновляемая поверхность, возможность контроля содержания изотопов водорода в установке за счет рециркуляции лития, уменьшение примесей в плазме за счет геттерирующих свойств лития [9–14]. Однако в силу низкой температуры испарения лития и высокой химической активности по отношению к водороду, необходима разработка методов эффективного сбора лития, испаренного с рабочих поверхностей, и минимизации накопления водорода. В термоядерных установках с жидколитиевыми элементами проблема сбора лития из газовой фазы является одной из ключевых для реализации замкнутого цикла лития, необходимого для создания установок со стационарным или квазистационарным режимом работы. Существенным вопросом является позиционирование коллектора, основанное на максимизации эффективности сбора лития. Это требует подробного изучения транспорта лития в пристеночной плазме в токамаках с диверторной конфигурацией. Такие экспериментальные работы в мире на данный момент находятся только в стадии планирования. Влияние использования лития на рециклинг водорода в термоядерных установках (водородный обмен плазмы и стенки) – один из наиважнейших вопросов в его применении как материала обращенных к плазме элементов [14]. При этом экспериментальная база по влиянию лития на накопление изотопов водорода в обращенных к плазме элементах недостаточна для полного понимания процесса [15, 16].

ЦЕЛИ, ЗАДАЧИ И СТАТУС РАЗРАБОТКИ ТОКАМАКА МИФИСТ

В институте ЛаПлаз НИЯУ МИФИ ведется разработка и создание компактного сферического токамака МИФИСТ для учебно-демонстрационных и исследовательских целей. Основными задачами являются подготовка кадров в области управляемого термоядерного синтеза для российских установок (Т-15МД, Т11-М и других) и международного реактора ИТЭР, а также решение инновационных задач в области термоядерных технологий. Это предполагает полностью "открытый" характер проекта с привлечением всех заинтересованных научных и учебных организаций. Важной особенностью проекта является максимально возможная цифровизация установки с тем, чтобы обеспечить, по возможности, удаленный доступ для студентов других университетов, специализирующихся в области термоядерных технологий с магнитным удержанием плазмы.

Кроме того, данная установка при успешной реализации проекта создания надежно действующего токамака будет использоваться и для решения ряда актуальных научно-технологических задач: ускоренной отработки технологий работы с литием, исследования удержания плазмы в сферическом токамаке, развития высокочастотных (ВЧ) технологий (СВЧ-предионизации и поддержания тока с помощью ВЧ-волн) и отработки методов *in situ* анализа взаимодействия плазмы с поверхностью.

На данный момент осуществлено проектирование учебно-демонстрационного и исследовательского токамака МИФИСТ, разработаны концепции систем диагностик и дополнительного нагрева плазмы, начато изготовление вакуумной камеры и элементов электромагнитной системы.

Основная концепция, заложенная в разработку данной установки – реализация максимального числа специфичных "токамачных" технологий получения, удержания и нагрева плазмы при минимальных затратах на сооружение и эксплуатацию. Кроме того, ее предназначение для учебно-демонстрационных целей предполагает применение простых, по возможности стандартных решений и удобство доступа к установке.

ОСНОВНЫЕ КОНСТРУКТИВНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ТОКАМАКА МИФИСТ

Схематичное изображение первоначального варианта установки представлено на рис. 1.

Основные параметры установки: большой радиус $R = 25$ см; малый радиус $a = 13$ см; аспектное отношение $A = R/a = 1.9$; вытянутость камеры $k \sim 3$; тороидальное поле на оси $B_\varphi \sim 0.5$ Тл; ток плазмы $I_{pl} \sim 100$ кА; длительность разряда $t \sim 10$–30 мс. В конструкцию токамака заложена возможность модернизации с увеличением поля в 4–5 раз (что соответствует рекордному значению для сферических токамаков) и тока в 2–3 раза.

Основные элементы электромагнитной системы, катушки тороидального поля, обеспечивающие магнитную изоляцию плазмы от стенок, расположенный в центре индуктор для создания и поддержания тока в плазме и система полоидальных витков, создающих необходимую конфигурацию плазменного шнура и его равновесие по большому радиусу и по вертикали, показаны на рис. 2.

Катушки тороидального поля спроектированы одновитковыми из тонкой листовой меди (с усилением на вертикальных участках), что позволяет им в момент импульса тока приобрести опти-

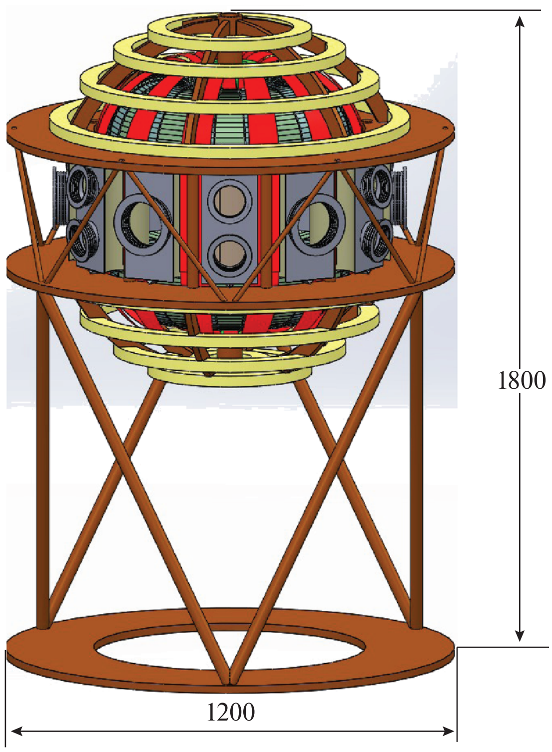

Рис. 1. Схематичное изображение сферического токамака МИФИСТ (размеры даны в мм).

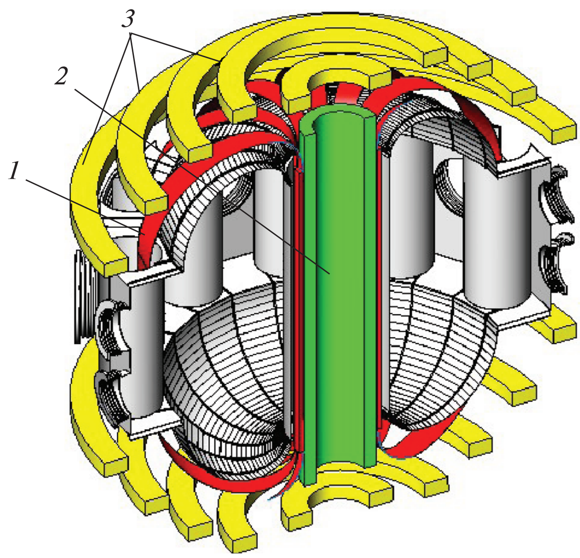

Рис. 2. Электромагнитная система токамака: *1* – катушки тороидального поля, *2* – индуктор, *3* – полоидальные катушки.

мальную "безмоментную" форму. Для питания электромагнитной системы токамака предполагается использовать конденсаторные батареи: низковольтные для питания тороидального соленоида и полоидальных катушек и с напряжением до 3 кВ для создания тока до 40 кА в обмотке индуктора.

Предусмотрено только воздушное охлаждение, поэтому скважность работы токамака определится остыванием элементов ЭМС после импульса. Схемы питания тороидальной обмотки, обмотки индуктора и системы полоидальных катушек и соответствующие циклограммы токов в них приведены на рис. 3.

Системы контроля и управления установкой являются неотъемлемой частью проекта и должны обеспечивать контроль за состоянием разрядной камеры, элементов электромагнитной системы, степенью вакуума и состава остаточных газов в установке.

На установке предусматривается применение классических методов диагностики плазмы, применяемых в токамаках [17], таких как электромагнитные зонды (зонды Мирнова) для контроля за положением плазменного шнура, пояса Роговского для измерения токов, зонды Ленгмюра для определения плотности и температуры плазмы на ее периферии, а также оптические спектроскопические методы, болометры для определения общих потерь энергии из плазмы, инфракрасная термометрия обращенных к плазме элементов, а в дальнейшем и методы, позволяющие измерять профили плотности и температуры в плазменном шнуре.

ПРОГРАММА РАБОТ И ПЕРСПЕКТИВЫ РАЗВИТИЯ ПРОЕКТА

Учебные задачи создаваемой установки были сформулированы выше и предполагают вовлечение в тематику УТС с магнитным удержанием студентов разных курсов, начиная с младших, а также постановку разнообразных лабораторных работ, НИРС, курсовых проектов и выпускных квалификационных работ не только по собственно физике плазмы, ее нагреву и удержанию, но и по другим необходимым технологиям (материаловедение, управление, компьютерное моделирование, разработка и верификация кодов, обработка больших массивов данных, автоматизация, проблемы надежности и работоспособности сложных элетрофизических установок). Диагностики, которые должны быть реализованы на действующей установке, предполагают применение разнообразных датчиков излучений, лазеров, зондов, спектрометров и т.д. Вполне естественно и оправданно привлечение к созданию и работам на установке зарубежных коллег, в том числе профессоров-совместителей нашего университета, а также зарубежных студентов.

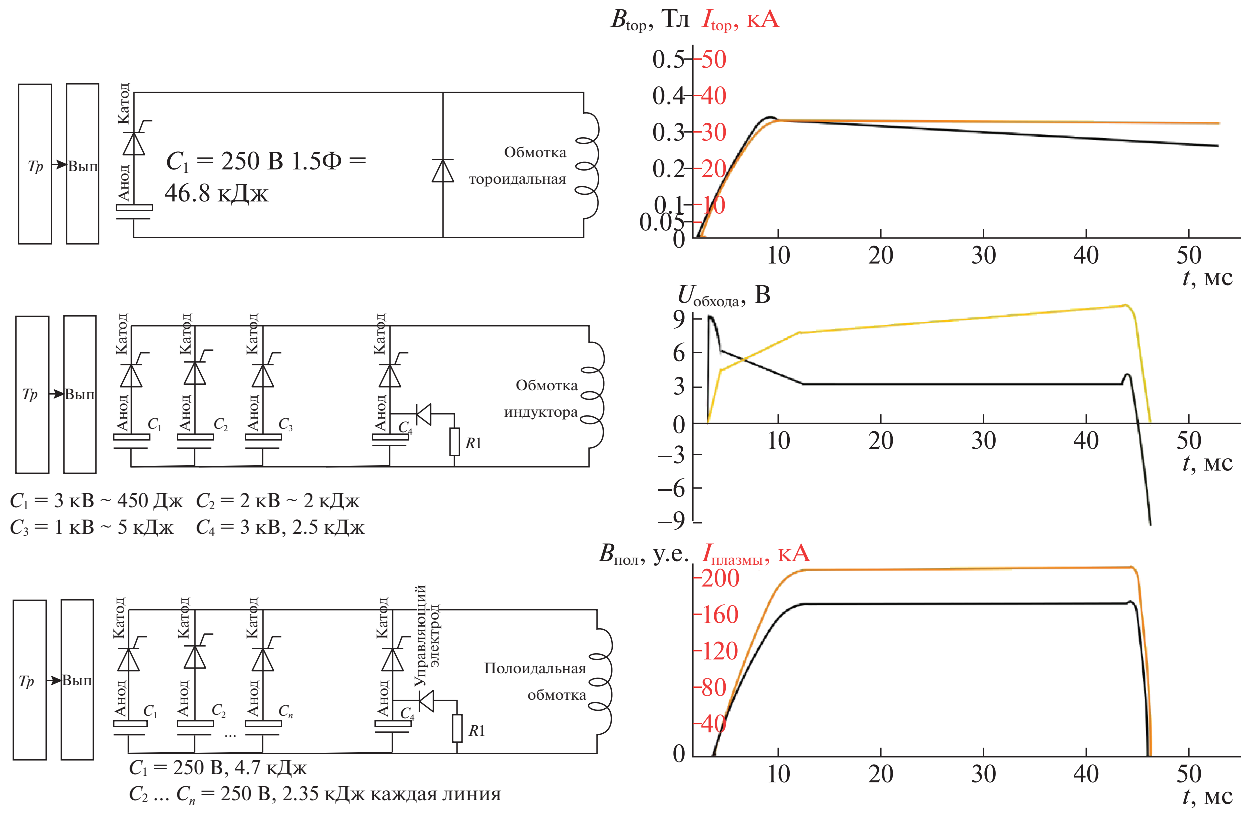

Рис. 3. Схемы питания и циклограммы токов в тороидальном соленоиде, индукторе и системе полоидальных обмоток.

Предварительная научная программа работ на установке включает проведение следующих исследований:

• исследование СВЧ-предыонизации и начальной фазы разряда (в интересах физической программы Т-15 МД);

• изучение физики взаимодействия плазмы с обращенными к ней материалами (углерод, вольфрам, литий) непосредственно в токамаке;

• отработка технологий применения жидких металлов (литий, олово, эвтектики) в токамаке с дивертором, реализация замкнутого цикла циркуляции металла в камере;

• проверка концепции режима с нулевым рециклингом водорода, предложенной Л.Е. Захаровым;

• отработка технологии применения программ восстановления равновесия плазменного шнура и формы плазмы по магнитным измерениям (EFIT);

• проверка перспективных концепций контроля и подавления неустойчивостей плазменного шнура вихревым магнитным полем;

• исследование динамики срыва разряда;

• отработка новых разработанных в МИФИ диагностик плазмы токамака;

• разработка сверхпроводящих элементов электромагнитной системы;

• отработка технологий создания стационарного плазменного разряда с помощью поддержания неиндукционного ВЧ-тока.

Естественно, данная программа будет уточняться и корректироваться в зависимости от достигнутых параметров установки и уровня финансирования.

В концепции данного сферического токамака заложена возможность широкого варьирования режимов и параметров плазмы. Наличие большого количества диагностических патрубков обеспечивает обширный объем регистрируемой информации и наглядность эксперимента. Малый размер токамака позволяет быстро осуществлять постановку новых экспериментов и определяет небольшое энергопотребление.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На токамаке МИФИСТ предполагается осуществить не только запуск и демонстрацию удержания плазмы в токамаке, но и исследовать важные для более крупных установок, таких как, например, Т-15МД, вопросы начальной предыонизации плазмы, особенности взаимодействия плазмы с обращенными к плазме элементами (ОПЭ) при применении лития, исследования процессов в плазме при высоких плотностях тока, реализации ВЧ-нагрева плазмы и экспериментов по поддержанию тока с помощью ВЧ-мощности. Малые габариты установки с небольшим аспектным отношением ($A < 2$) и простота конструкции позволяют ускорить проведение экспериментов с изменением как параметров взаимодействия плазмы с ОПЭ, так и величины тороидального магнитного поля и особенно удобны для учебно-демонстрационных целей.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Данная работа выполнена при финансовой поддержке Программы повышения конкурентоспособности НИЯУ МИФИ.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Cheng E.T., Cerbone R.J., Garner J.K., Simnad M., Sviatoslavsky I.N., Wang X.R., Peng Y.K.M., Galambos J.D.* Actinides transmutation with small tokamak fusion reactors. In: Proc. Intern. Conf. Evaluation of Emerging Nuclear Fuel Cycle Systems. Versalles, France, 1995.
2. *Qiu L.J., Wu Y.C., Xiao B.J., Xu Q., Huang Q.Y., Wu B., Chen Y.X., Xu W.N., Chen Y.P., and Liu X.P.* A low aspect ratio tokamak transmutation system. *Nucl. Fusion*. 2000. V. 40. P. 629. https://doi.org/10.1088/0029-5515/40/3Y/325
3. *Wu Y.C., Qian J.P., Yu J.N.* The fusion-driven hybrid system and its material selection. *J. of Nuclear Materials*. 2002. V. 307–311. P. 1629–1636. https://doi.org/10.1016/S0022-3115(02)01272-2
4. *Wesson J. and Campbell D.* “Tokamaks”. *Clarendon Press*. 2004. P. 115.
5. *Wu.Y., Zheng S., Zhu X., Wang W., Wang H., Liu S., Bai Y., Chen M., Huang Q., Huang D. Zhang. S., Li J., Chu D., Jiang J., Song Y.* Conceptual design of the fusion-driven subcritical system FDS-I. *Fusion Eng. Des.* 2006. V. 81. P. 1305–1311.
6. *Azizov E.A., Arefiev Yu.P., Buzhinskij O.I., Gladush G.G., Dokuka V.N. et al.* Plasma-physical and electrophysical aspects of the compact stationary neutron source on the basis of tokamak. *Ibid.* 2005. V. 13. P. 167.
7. *Sykes A.* Overview of recent spherical tokamak results. *Plasma Phys. Control. Fusion*. 2001. V. 43. № 12A. P. 127. https://doi.org/10.1088/0741-3335/43/12A/309
8. *Zohm H., Angioni C., Fable E., Federici G., Gantenbein G., Hartmann T., Lackner K., Poli E., Porte L., Sauter O., Tardini G., Ward D., Wischmeier M.* On the physics guidelines for a tokamak DEMO. Nuclear Fusion. 2013. V. 53. № 7. P. 073019. https://doi.org/10.1088/0029-5515/53/7/073019
9. *Popkov A.S., Krat S.A., Gasparyan Y.M., Pisarev A.A.* Interaction of Li-D Films with Water Vapor. *Phys. Procedia*. 2015. V. 71. P. 88–92. https://doi.org/10.1016/j.phpro.2015.08.319
10. *Popkov A.S., Krat S.A., Gasparyan Y.M., Vasina Y.A., Pisarev A.A.* On the interaction of Li–D films with nitrogen and oxygen at room temperature. *J. Surf. Investig.* 2016. V. 10. P. 860–863. https://doi.org/10.1134/S1027451016040352
11. *Gasparyan Y.M., Popkov A.S., Krat S.A., Pisarev A.A., Vasina Y.A., Lyublinski I.E., Vertkov A.V.* Deuterium release from Li-D films exposed to atmospheric gases. Fusion Eng. Des. 2017. V. 117. P. 163–167. https://doi.org/10.1016/j.fusengdes.2016.07.025
12. *Mirnov S.V., Dem'yanenko V.N., Murav'ev E.V.*, Liquid-metal tokamak divertors. *J. Nucl. Mater.* 1992. V. 196–198. P. 45–49. https://doi.org/10.1016/S0022-3115(06)80010-3
13. *Lyublinski I.E., Evtikhin V.A., Pankratov V.Yu., Krasin V.P.* Numerical and experimental determination of metallic solubilities in liquid lithium, lithium-containing nonmetallic impurities, lead and lead-lithium eutectic. *J. Nucl. Mater.* 1995. V. 224. P. 288–292. https://doi.org/10.1016/0022-3115(95)00076-3
14. *Zakharov L.E.* On a burning plasma low recycling regime with P DT = 23–26 MW, Q DT = 5–7 in a JET-like tokamak. *Nuclear Fusion*. 2019. V. 59. № 9. P. 096008. https://doi.org/10.1088/1741-4326/ab246b
15. *Krat S.A., Gasparyan Y.M., Popkov A.S., Pisarev A.A.* Deuterium release from lithium–deuterium films, deposited in the magnetron discharge. *Vacuum*. 2014. V. 105. P. 111–114. https://doi.org/10.1016/j.vacuum.2014.01.006
16. *Mirnov S.V., Azizov E., Evtikhin V., Lazarev V., Lyublinski I.E., Vertkov A., Prokhorov D.* Experiments with lithium limiter on T-11M tokamak and applications of the lithium capillary-pore system in future fusion reactor devices. *Plasma Phys. Control. Fusion*. 2006. V. 48. P. 821–837. https://doi.org/10.1088/0741-3335/48/6/009
17. *Стрелков В.С., Лысенко С.Е.* Основы техники термоядерного эксперимента, Учебное пособие. М.: НИЯУ МИФИ, 2015. 188 с.

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI", 2019, vol. 8, no. 6, pp. 491–497

The Status of the Drafting of Mephist Tokamak

V. A. Kurnaev [a], V. E. Nikolaeva[a,#], G. M. Vorobyov[a], Yu. M. Gasparyan[a], D. P. Ivanov[a,b], S. A. Krat[a,b], and A. V. Melnikov[a,b]

[1] *National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia*

[2] *National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, 123098 Russia*

[#]*e-mail: venikolaeva@mephi.ru*

Received August 3, 2019; revised September 25, 2019; accepted October 1, 2019

Abstract—A compact spherical tokamak MEPhIST (MEPhI Spherical Tokamak) aimed at educational, demonstration and research purposes is under development at Institute of Laser and Plasma technologies (LaPlas) at NRNU MEPhI. The main purposes are training in the field of controlled thermonuclear fusion for Russian installations (T-15MD, T11-M and others) and the international ITER reactor, as well as solving innovative problems in the field of fusion technologies. An important feature of this project is the most possible digitalization of the installation in order to provide a remote access for students of other universities specializing in the field of fusion technologies with magnetic plasma confinement. With the successful implementation of the project to create a reliable tokamak, this installation will be used to solve a number of urgent scientific and technological problems: acceleration of lithium technologies development, studies of plasma confinement in a spherical tokamak, development of high-frequency (RF) technologies (microwave preionization and steady-state RF current drive) and to develop in situ methods for analyzing plasma-surface interaction. At this stage, the design of the educational, demonstration and research tokamak MEPhIST has been carried out, the concepts of diagnostic systems and additional heating of the plasma have been developed, the production of a vacuum chamber and elements of an electromagnetic system has been started.

Key words: fusion, magnetic plasma confinement, tokamak, plasma

DOI: 10.1134/S2304487X19060087

REFERENCES

1. Cheng E.T., Cerbone R.J., Garner J.K., Simnad M., Sviatoslavsky I.N., Wang X.R., Peng Y.K.M., Galambos J.D. Actinides transmutation with small tokamak fusion reactors. *In: Proc. Intern. Conf. Evaluation of Emerging Nuclear Fuel Cycle Systems*. Versalles, France, 1995.
2. Qiu L.J., Wu Y.C., Xiao B.J., Xu Q., Huang Q.Y., Wu B., Chen Y.X., Xu W.N., Chen Y.P., and Liu X.P. A low aspect ratio tokamak transmutation system. *Nucl. Fusion*, 2000, vol. 40, p. 629.
3. Wu Y.C., Qian J.P., Yu J.N. The fusion-driven hybrid system and its material selection. *J. of Nuclear Materials*, 2002, vol. 307–311, pp. 1629–1636.
4. Wesson J. and Campbell D. "Tokamaks". *Clarendon Press*, 2004, p. 115.
5. Wu.Y., Zheng S., Zhu X., Wang W., Wang H., Liu S., Bai Y., Chen M., Huang Q., Huang D. Zhang. S., Li J., Chu D., Jiang J., Song Y. Conceptual design of the fusion-driven subcritical system FDS-I. *Fusion Eng. Des.*, 2006, vol. 81, pp. 1305–1311.
6. Azizov E.A., Arefiev Yu.P., Buzhinskij O.I., Gladush G.G., Dokuka V.N. et al. Plasma-physical and electrophysical aspects of the compact stationary neutron source on the basis of tokamak. *Ibid.*, 2005, vol. 13, p. 167.
7. Sykes A. Overview of recent spherical tokamak results. *Plasma Phys. Control. Fusion*, 2001, vol. 43, no. 12A. P. 127.
8. Zohm H., Angioni C., Fable E., Federici G., Gantenbein G., Hartmann T., Lackner K., Poli E., Porte L., Sauter O., Tardini G., Ward D., Wischmeier M. On the physics guidelines for a tokamak DEMO. *Nuclear Fusion*, 2013, vol. 53, no. 7, p. 073019. doi: 10.1088/0029-5515/53/7/073019.
9. Popkov A.S., Krat S.A., Gasparyan Y.M., Pisarev A.A. Interaction of Li-D Films with Water Vapor. *Phys. Procedia.*, 2015, vol. 71, pp. 88–92. doi: 10.1016/j.phpro.2015.08.319.
10. Popkov A.S., Krat S.A., Gasparyan Y.M., Vasina Y.A., Pisarev A.A. On the interaction of Li–D films with nitrogen and oxygen at room temperature. *J. Surf. Investig.*, 2016, vol. 10, pp. 860–863. doi: 10.1134/S1027451016040352.
11. Gasparyan Y.M., Popkov A.S., Krat S.A., Pisarev A.A., Vasina Y.A., Lyublinski I.E., Vertkov A.V. *Deuterium release from Li-D films exposed to atmospheric gases. Fusion Eng. Des.*, 2017, vol. 117, pp. 163–167. doi: 10.1016/j.fusengdes.2016.07.025.

12. Mirnov S.V., Dem'yanenko V.N., Murav'ev E.V., Liquid-metal tokamak divertors. *J. Nucl. Mater.*, 1992, vol. 196–198, pp. 45–49. doi: 10.1016/S0022-3115(06)80010-3.

13. Lyublinski I.E., Evtikhin V.A., Pankratov V.Yu., Krasin V.P., Numerical and experimental determination of metallic solubilities in liquid lithium, lithium-containing nonmetallic impurities, lead and lead-lithium eutectic. *J. Nucl. Mater.*, 1995, vol. 224, pp. 288–292. doi: 10.1016/0022-3115(95)00076-3.

14. Zakharov L.E. On a burning plasma low recycling regime with P DT = 23–26 MW, Q DT = 5–7 in a JET-like tokamak. *Nuclear Fusion*, 2019, vol. 59, no. 9, p. 096008. doi: 10.1088/1741-4326/ab246b.

15. Krat S.A., Gasparyan Y.M., Popkov A.S., Pisarev A.A. Deuterium release from lithium–deuterium films, deposited in the magnetron discharge. *Vacuum.*, 2014, vol. 105, pp. 111–114. doi: 10.1016/j.vacuum.2014.01.006.

16. Mirnov S.V., Azizov E., Evtikhin V., Lazarev V., Lyublinski I.E., Vertkov A., Prokhorov D. Experiments with lithium limiter on T-11M tokamak and applications of the lithium capillary-pore system in future fusion reactor devices. *Plasma Phys. Control. Fusion,* 2006, vol. 48, pp. 821–837. doi: 10.1088/0741-3335/48/6/009.

17. Strelkov V.S., Lysenko S.E. Osnovy tekhniki termoyadernogo eksperimenta. [Fundamentals of the fusion experiment technology], Moscow, NRNU MEPhI, 2015. 188 p.

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА “МИФИ”, 2019, том 8, № 6, с. 498–506

ТЕХНИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 621.039.31

ТОПЛИВНЫЙ ЦИКЛ ЛЕГКОВОДНОГО РЕАКТОРА С ПОЛНЫМ ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РЕГЕНЕРИРОВАННОГО УРАНА

В. А. Невиница[1], А. Ю. Смирнов[1,2,*], Г. А. Сулаберидзе[2], В. Е. Гусев[2], А. М. Павловичев[1], А. И. Щеренко[1], Е. В. Родионова[1], В. Ю. Бландинский[1]

[1] Национальный исследовательский центр “Курчатовский институт”, Москва, 123098, Россия

[2] Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409, Россия

**e-mail: a.y.smirnoff@rambler.ru*

Поступила в редакцию 18.09.2019 г.
После доработки 25.09.2019 г.
Принята к публикации 01.10.2019 г.

Рассмотрена проблема многократного рециклирования урана в топливном цикле реакторов на тепловых нейтронах. Основные пути повторного использования выделенного из отработавшего топлива регенерированного урана связаны с его обогащением по целевому делящемуся изотопу ^{235}U в каскадах газовых центрифуг. Однако этот процесс технически затруднителен из-за присутствия в его изотопном составе искусственных изотопов $^{232,\,236}$U, а также повышенного по отношению к природному урану содержания ^{234}U. Из-за накладываемых на содержание указанных изотопов ограничений, связанных с требованиями к радиационным и нейтронно-физическим характеристикам низкообогащенного урана, при попытке многократного рецикла регенерированного урана возникают препятствия для полного возврата материала в цикл с использованием предложенных на сегодняшний момент схем его обогащения. Это обуславливает необходимость поиска новых схем обогащения регенерата, позволяющих решать указанную проблему.

В работе на основе модифицированного двойного каскада предложен способ, позволяющий получить продукт, удовлетворяющий ограничениям по всем четным изотопам урана, и расходующий на его производство заданное количество регенерата. Предложенную схему каскада целесообразно использовать в условиях многократного рецикла урана, начиная со второго рецикла, а также в условиях постоянного производства регенерированного топлива для парка реакторов на тепловых нейтронах.

Ключевые слова: регенерированный уран, двойной каскад, многопоточный каскад, ОЯТ, разделительный каскад, обогащение урана

DOI: 10.1134/S2304487X19060075

ВВЕДЕНИЕ

Одним из факторов возможного удорожания электроэнергии, вырабатываемой на АЭС, является проблема издержек заключительной стадии топливного цикла [1]. Снижение издержек возможно, в первую очередь, за счет выделения урана и плутония из отработавшего топлива для их последующего рециклирования, а также уменьшения объема захоронения РАО. Более 95% состава ОЯТ приходится на уран, который составляет основную часть потока рециклируемых материалов. Как показали оценки, рецикл дообогащенного регенерированного урана позволяет экономить до 20.5% природного урана при раздельном рецикле урана, и около 32% при совместном рецикле с плутонием (вклад плутония в экономию природного урана не превышает 11%, причем он снижается по мере роста числа рециклов, а остальная часть приходится на регенерированный уран). Вместе с тем, осуществлять рецикл регенерированного урана несколько сложнее, чем использовать для изготовления топлива природный уран. Так, в работе [1] основными трудностями при использовании регенерата считают необходимость компенсировать дополнительным обогащением присутствие в изотопном составе регенерированного урана изотопа ^{236}U, привносящего дополнительное поглощение тепловых нейтронов, а также рост содержания альфа-активного изотопа ^{232}U, цепочка радиоактивного распада которого включает в себя ^{208}Tl, излучающий гамма-кванты с энергией около 2.6 МэВ. Поэтому изотоп ^{232}U принято считать одним из основных загрязнителей замкнутого по урану топливного цикла и строго регламентировать его содержание [2]. С другой стороны, фактически основным альфа-излучателем в регенерированном уране является не ^{232}U, а ^{234}U, содержание ко-

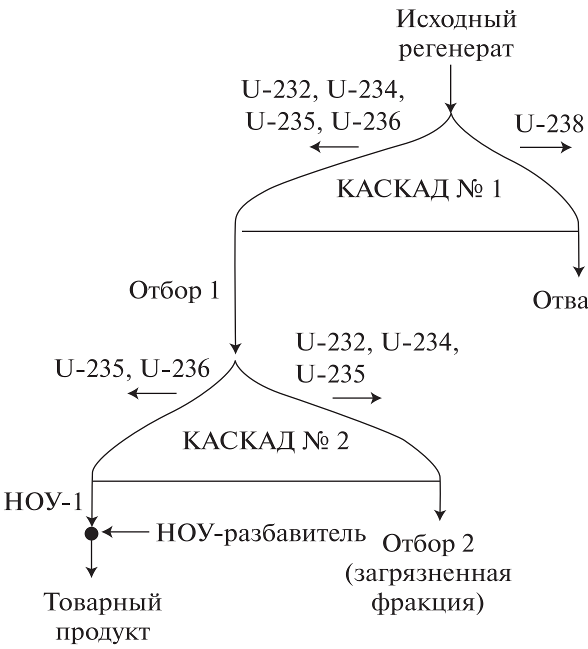

Рис. 1. Схема двойного каскада для рецикла регенерированного урана с разбавлением низкообогащенным ураном на выходе.

торого регулируется, в частности, спецификациями ASTM и национальными техническими условиями [3]. Присутствие же альфа-активных изотопов в регенерате урана важно контролировать не только с точки зрения безопасности персонала предприятий, на которых происходит дообогащение регенерата и изготовление топлива, но и с точки зрения возможных процессов диссоциации (и рекомбинации) гексафторида урана, происходящих под воздействием альфа-излучения [4].

Как показывают результаты работ [3, 5–18], на текущий момент предложены способы дообогащения регенерата, которые могут справиться и с проблемой не превышения допустимых содержаний изотопов ^{232}U и ^{234}U, и с проблемой компенсации ^{236}U. Одна из нерешенных проблем при использовании регенерированного урана заключается в следующем: в процессе многократного рецикла регенерата концентрация изотопа ^{232}U в нем в определенный момент достигает такого уровня, что одновременное выполнение условий по содержанию ^{232}U, ^{234}U, ^{236}U становится возможным только при сокращении удельного расхода регенерата на единицу получаемого продукта, даже при условии сохранения достаточно высокой экономии природного урана (до 50%) [3]. Это означает, что, начиная с определенного рецикла, не всегда удастся использовать весь регенерат, выделенный из топлива конкретной загрузки реактора, для производства топлива последующих загрузок этого же реактора. В этой ситуации остаются два наиболее очевидных пути. Первый заключается в увеличении объема производимого из регенерата топлива (при сохранении удельного расхода регенерата на единицу производимого продукта). Этот путь фактически приведет к увеличению количества реакторов, загружаемых топливом из регенерата урана, выделенного из одного конкретного реактора. Второй путь заключается в отправке неиспользованной части регенерата для складирования на неопределенный срок. Указанные возможности не всегда могут быть приемлемыми.

Анализ предложенных на сегодняшний день решений относительно обогащения регенерата урана показывает, что наиболее полно удовлетворяют требованиям максимального использования регенерата так называемые двойные каскадные схемы, представляющие собой последовательное соединение двух разделительных каскадов [6, 8, 14]. В работе [18] предложена модификация схемы двойного каскада, позволяющая одновременно удовлетворить ограничениям, накладываемым на содержания ^{232}U, ^{234}U, ^{236}U в соответствии с техническими условиями и международными спецификациями (рис. 1). Основная идея работы такого каскада состоит в том, чтобы в одном из потоков сконцентрировать гексафторид урана, содержащий основную долю изотопа ^{232}U (естественно, вместе со всеми сопутствующими изотопами), а на изготовление топлива направлять гексафторид урана из другого потока, обедненного по изотопу ^{232}U. При этом для достижения требуемого соотношения между исходным регенератом и продуктом необходимо подмешивание к этому потоку смеси, не содержащей ^{232}U, а именно: низкообогащенного урана природного происхождения. Результаты проведенных вычислительных экспериментов показали, что такая схема позволяет получить продукт с допустимым содержанием четных изотопов и одновременным обеспечением заданного расхода регенерата на единицу продукта. Важно отметить, что масса фракции, в которой сконцентрирован изотоп ^{232}U (“Отбор 2” на схеме рис. 1), в зависимости от выбора параметров первого и второго каскадов, составляет от 0.6% до 3.1% от массы всего регенерированного урана, направленного на дообогащение. Другими словами, задача полного использования всего регенерированного урана для изготовления топлива практически решается.

Проблема заключается в том, что при крупном масштабе переработки ОЯТ и последующем обогащении регенерата масса обогащенной по изотопам ^{235}U и ^{232}U фракции может оказаться существенной с точки зрения процедур обращения с данным материалом. Оценки показывают, что, например, при обогащении регенерата, полученного после переработки всех одновременно перегружаемых 72 ОТВС реактора типа ВВЭР-1200, масса загрязненной фракции, в зависимости от выбранных параметров первого и второго каскадов, может составлять от 350 до 960 кг. Этот материал является, с одной стороны, сильно радиоактивным, поскольку содержит большую часть изотопа ^{232}U, с другой стороны, содержит большое количество изотопа ^{235}U, поскольку обогащение урана по этому изотопу может составлять величину около 20% [18]. В соответствии с "Основными правилами учета и контроля ядерных материалов" НП-030-12 этот материал может быть переведен в РАО лишь в том случае, если количество такого материала в организации не превышает 15 грамм. Это означает, что обращение с подобным побочным продуктом обогащения регенерата должно осуществляться именно как обращение с ядерным материалом, с соблюдением требований по ядерной и радиационной безопасности.

Длительное хранение этого материала позволит снизить уровень загрязнения изотопом ^{232}U вследствие его распада и получить в итоге слаборадиоактивный уран с обогащением 20%, который впоследствии также можно использовать для производства топлива. Однако среди способов его хранения должны быть рассмотрены и обесфторивание, с последующим хранением в виде закиси-окиси, и хранение в виде гексафторида урана. С учетом того, что современные установки по конверсии обедненного гексафторида урана предназначены для переработки слаборадиоактивного материала, первый способ может потребовать строительства специальных установок для переработки сильно радиоактивного гексафторида урана. Но и хранение в виде гексафторида требует обоснования с точек зрения безопасности из-за высокого тепловыделения радиоактивного распада, а также радиационной стойкости гексафторида урана под длительным (порядка 20–30 лет) воздействием альфа-излучения с одновременным выполнением требований ядерной безопасности (в силу обогащения 20%). Третьим, и, возможно, наиболее простым, способом обращения с этим материалом, является его разбавление гексафторидом отвального урана. При достаточно сильном разбавлении результирующий гексафторид обедненного урана будет слаборадиоактивным и его можно будет подвергнуть конверсии на существующих установках. Однако это будет означать потерю затраченной работы разделения и потерю от 70 до 190 кг ^{235}U (в виде урана с обогащением 20%) на каждые 72 переработанные ОТВС.

В настоящей работе предложен способ обращения с образовавшимся в результате обогащения регенерата в двойном каскаде гексафторидом урана с высоким содержанием изотопов $^{232-235}U$. Предлагается вовлекать этот материал после его накопления в результате обогащения изначальной партии регенерата, поступившей на обогатительное производство в обогащение следующей партии регенерированного урана из переработанных ОТВС. Показано, что реализация предлагаемой схемы позволяет полностью израсходовать как вновь поступивший на повторное обогащение регенерированный уран, так и проблемный промежуточный продукт, оставшийся после прошлой операции по дообогащению – гексафторид высокообогащенного урана с относительно высоким содержанием ^{232}U. Таким образом, предлагаемый способ позволяет избежать необходимости длительного хранения обоих указанных материалов.

ОПИСАНИЕ ПРЕДЛАГАЕМОГО РЕШЕНИЯ

Рассмотрим подробнее способ организации топливного цикла, позволяющий вовлечь накапливаемый при использовании схемы двойного каскада (рис. 1) загрязненный гексафторид урана. Основная идея заключается в том, что поскольку данная схема предназначена для дообогащения регенерата с любым содержанием изотопа ^{232}U, то вполне естественным представляется использовать этот же каскад для того, чтобы утилизировать полученный в потоке отбора загрязненный изотопом ^{232}U гексафторид урана. В этом случае он может быть разбавлен не обедненным ураном, а непосредственно регенератом, полученным из следующей партии отработавшего топлива (рис. 2).

Процесс возврата данного материала в воспроизводство низкообогащенного урана может быть начат практически после дообогащения регенерата уже для одной ТВС и даже для ее части (непрерывный возврат), схема каскада при этом преобразуется к виду, изображенному на рис. 3.

Очевидно, что при использовании предлагаемой схемы и непрерывной работе завода по обогащению, удастся полностью замкнуть топливный цикл по урану, а единственным отходом производства станет только обедненный гексафторид, образующийся в отвале первого каскада. Однако данный продукт можно считать штатным отходом обогатительного производства, для которого на сегодняшний день отработаны технологии хранения и переработки. При этом после вывода завода из эксплуатации (или остановки на планово-предупредительный ремонт) останется невостребованным только тот объем обогащенного по изотопу ^{232}U гексафторида урана, который будет образован после обогащения последней партии регенерата на этом заводе. Таким образом, предлагаемый в настоящей статье подход к дообога-

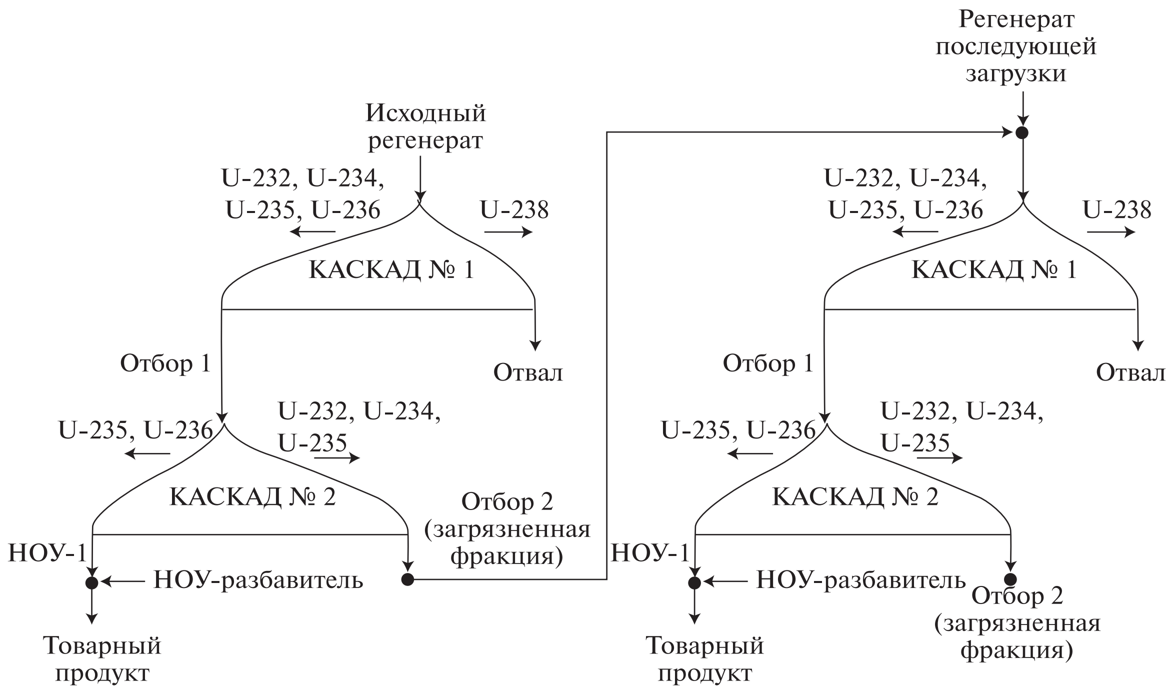

Рис. 2. Схема передачи загрязненной изотопом ^{232}U фракции гексафторида урана в двойном каскаде от первой партии дообогащенного регенерированного урана к последующей.

щению регенерата урана позволяет организовать полный возврат регенерированного урана в топливный цикл в течение практически всего жизненного цикла топлива легководных реакторов, работающих в замкнутом топливном цикле.

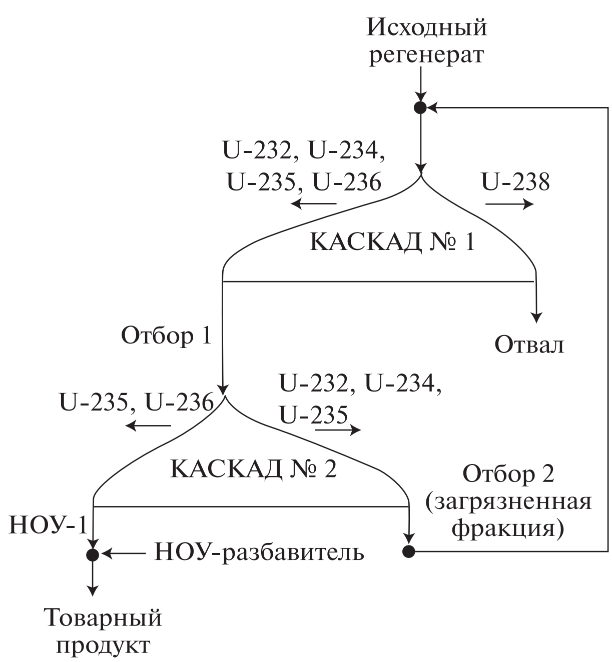

Рис. 3. Схема двойного каскада с возвратом потока отбора.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Рассмотрим возможную организацию топливного цикла легководного реактора с полным использованием регенерированного урана на примере реактора типа ВВЭР-1200, работающего в установившемся режиме перегрузок. Следует отметить, что для данного рассмотрения, в целом, безразлично, в каком виде осуществляется многократный рецикл регенерированного урана – в виде топлива из диоксида урана (РУТ-топливо) или в виде оксида дообогащенного регенерированного урана в смеси с плутонием (РЕМИКС-топливо), поскольку в обоих случаях схема обогащения регенерата будет одной и той же. Для определенности рассмотрим РУТ-топливо. Считаем, что топливо стационарной топливной загрузки, с которой начат переход к работе ВВЭР-1200 в замкнутом топливном цикле, изготовлено из природного урана. При этом в активную зону загружают 24 и 48 свежих ТВС с обогащением топлива твэлов 4.4% и 4.95% соответственно. В ТВС установлены уран-гадолиниевые выгорающие поглотители в количестве от 6 до 24 штук. После перехода к ЗЯТЦ топливо направляется на переработку, а полученный в результате переработки уран – на дообогащение. Предполагаем, что твэги (тепловыделяющие элементы, содержащие выгораю-

Таблица 1. Изотопные составы и расходы природного урана для изготовления топлива для перегрузок реактора типа ВВЭР-1200 (без учета твэгов): исходный состав и топливо первого рецикла

Источник сырья	Исходный состав		Топливо первого рецикла	
Обогащение, %	4.95	4.4	4.95	4.4
Расход природного урана, кг	169103.5	72483.98	134470.00	55795.00
Расход регенерата, кг	–	–	20620	9969
Расход работы разделения, отн. ед	249413	103570	230570	98143
Изотопный состав, %				
^{232}U	0	0	3.09×10^{-7}	3.09×10^{-7}
^{233}U	0	0	1.13×10^{-6}	1.13×10^{-6}
^{234}U	4.1×10^{-2}	3.7×10^{-2}	5.52×10^{-2}	5.05×10^{-2}
^{235}U	4.95	4.4	5.133	4.586
^{236}U	0	0	4.13×10^{-1}	4.21×10^{-1}
^{238}U	Остальное	Остальное	Остальное	Остальное

щий поглотитель гадолиния), в силу их незначительного количества, всегда изготавливаются только на основе обогащенного природного урана. В этом случае, регенерат урана, получаемый после переработки 72 ОТВС направляют на обогащение и последующее изготовление двух партий твэлов, используемых в стационарной загрузке: с обогащением 4.95% и 4.4%. Поскольку полученный из ОЯТ регенерат, направляемый на первый рецикл, имеет наименьшее содержание изотопа ^{232}U, то его дообогащение (с одновременным выполнением условия полного использования регенерата) может быть выполнено в одной из модификаций трехпоточного (питание, отбор и отвал) или ординарного каскада [3, 7].

В настоящей работе для получения состава обогащенного регенерата после первого цикла облучения рассмотрена простейшая модификации ординарного каскада – каскад с разбавлением на входе [7]. В табл. 1 представлены экономически значимые параметры (расход природного урана и затраты работы разделения) такого каскада для двух уровней обогащения по ^{235}U и сопоставлены с аналогичными параметрами базового варианта каскада, обогащающего природный уран для получения низкообогащенного топлива. Помимо указанных параметров в табл. 1 приведены также изотопные составы получаемых продуктов. При этом следует заметить, что во всех приводимых данных концентрации выражены в массовых долях. В качестве расчетной модели выступала модель квазиидеального каскада [16], часто используемая в теории разделения многокомпонентных изотопных смесей.

Поскольку на первом рецикле в отходах обогащения не образовывалось отдельной фракции (потока), обогащенной по изотопу ^{232}U, то параметры облученного топлива первого рецикла одинаковы для всех перегрузок реактора, относящихся к первому рециклу. После облучения в реакторе, выдержки в течение 6 лет и с учетом изменения изотопного состава за время транспортировки и переработки, отработавшее РУТ-топливо содержит существенно больше изотопа ^{232}U, чем ОЯТ, для изготовления которого использовали природный уран. Поэтому, начиная со второго рецикла, для дообогащения регенерированного урана с одновременным выполнением условия его полного возврата использование ординарных каскадов затруднительно [18]. В рамках настоящей работы предполагали, что ординарный каскад заменяют двойным каскадом, схема которого изображена на рис. 1. Полученная после дообогащения регенерата первой партии регенерата (или регенерата, выделенного из первой выгруженной группы ТВС из реактора, работающего на РУТ-топливе первого рецикла) фракция, обогащенная по изотопу ^{232}U и имеющая 20% содержание изотопа ^{235}U смешивается с регенератом, полученным после переработки второй партии ОТВС. Полученную смесь направляют на дообогащение (рис. 2). Результаты расчета параметров двойных каскадов для этого случая приведены в табл. 2. В случае, когда возврата потока отбора не происходит, параметры топлива для всех перегрузок второго рецикла совпадают с параметрами первой перегрузки из табл. 2, а изотопный состав урана, попадающего в отходы на каждой перегрузке, и его количество, совпадает с составом возвращаемой фракции первой перегрузки из табл. 2. При расчете параметров двойных каскадных схем в качестве расчетной модели также использован квазиидеальный каскад.

Таблица 2. Изотопные составы и расходы природного урана для изготовления топлива для перегрузок реактора типа ВВЭР-1200 (без учета твэгов): топливо второго рецикла

Номер перегрузки	Первая перегрузка		Вторая перегрузка		Третья перегрузка	
Обогащение, %	4.95	4.4	4.95	4.4	4.95	4.4
Расход природного урана, кг	139802.03	58291.31	135568.06	56351.24	133649.39	56868.39
Расход регенерата, кг	20604.65	9961.54	20860.12	10082.89	20929.42	10118.12
Расход работы разделения, отн. ед.	263368.8	109887.15	254313.79	106009.0	252276.2	108260.45
Масса возвращаемой фракции, кг	255.47	121.36	324.77	156.59	329.34	220.37
Изотопный состав топлива, %						
^{232}U	4.43×10^{-7}	4.34×10^{-7}	4.80×10^{-7}	4.85×10^{-7}	5.92×10^{-7}	4.92×10^{-7}
^{233}U	1.33×10^{-6}	1.32×10^{-6}	1.50×10^{-6}	1.51×10^{-6}	1.74×10^{-6}	1.50×10^{-6}
^{234}U	5.87×10^{-2}	5.40×10^{-2}	6.14×10^{-2}	5.68×10^{-2}	6.38×10^{-2}	5.63×10^{-2}
^{235}U	5.154	4.607	5.207	4.658	5.212	4.634
^{236}U	4.76×10^{-1}	4.91×10^{-1}	6.16×10^{-1}	6.14×10^{-1}	6.22×10^{-1}	5.61×10^{-1}
^{238}U	Остальное	Остальное	Остальное	Остальное	Остальное	Остальное
Изотопный состав возвращаемой фракции, %						
^{232}U	1.64×10^{-5}	1.75×10^{-5}	2.32×10^{-5}	2.36×10^{-5}	2.57×10^{-5}	2.34×10^{-5}
^{233}U	3.98×10^{-5}	4.17×10^{-5}	5.16×10^{-5}	5.21×10^{-5}	5.49×10^{-5}	5.15×10^{-5}
^{234}U	5.88×10^{-1}	6.03×10^{-1}	6.78×10^{-1}	6.81×10^{-1}	6.96×10^{-1}	6.73×10^{-1}
^{235}U	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00	20.00
^{236}U	7.11	7.04	6.54	6.54	6.46	6.55
^{238}U	Остальное	Остальное	Остальное	Остальное	Остальное	Остальное

Как видно из данных табл. 2 предложенная схема рециклирования действительно позволяет полностью израсходовать и исходный регенерированный уран и образующийся в результате использования двойного каскада высокообогащенный отход.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе предложен способ организации работы двойного каскада с полным возвратом регенерата урана в производство топлива. При этом возврат высоокообогащенного регенерата, загрязненного изотопом ^{232}U, при изготовлении топлива для второй и третьей стационарных перегрузок реактора позволяет снизить суммарные затраты природного урана и работы разделения по сравнению с затратами природного урана и работы разделения для изготовления топлива первой перегрузки второго рецикла. В первую очередь это происходит за счет увеличения доли регенерированного урана, используемой при изготовлении топлива. Это преимущество не является основным при переходе на схему двойного каскада с возвратом потока отбора. Основным преимуществом является отсутствие поступления на склад при изготовлении топлива для каждой перегрузки урана с обогащением 20% и содержанием изотопа ^{232}U на уровне 10^{-5}%, которое на два порядка превосходит допустимые содержания этого изотопа. В силу того, что содержание изотопа ^{234}U также существенно превышает уровни, допустимые спецификацией ASTM, уровень тепловыделения радиоактивного распада и необходимость обеспечить ядерную безопасность серьезно затрудняют обращение с этой фракцией. Отсутствие указанных проблем и является главным преимуществом от использования подобной схемы.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Работа выполнена при поддержке НИЦ “Курчатовский институт”, приказ о проведении НИР № 1879 от 22.08.2019.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Похитонов Ю.А.* Как можно снизить стоимость переработки облученного топлива и обеспечить надежную изоляцию всех отходов? // Радиохимия. 2017. Т. 59. № 6. С. 481–487.

2. *Кислов А.И., Титов А.А., Дмитриев А.М., Синцов А.Е.* Радиационные аспекты использования регенерированного урана на ОАО "МСЗ" при производстве ядерного топлива // Ядерная и радиационная безопасность. 2012. Специальный выпуск.
3. *Бландинский В.Ю., Гроль А.В., Дудников А.А. Невиница В.А., Фомиченко П.А., Смирнов А.Ю., Сулаберидзе Г.А.* Согласованный подход к моделированию выгорания при облучении и молекулярно-селективных процессов в разделительном каскаде для оценки перспектив раздельного рецикла регенерированного урана топлива в легководном реакторе // Вопросы атомной науки и техники, серия: "Ядерно-реакторные константы". 2018. № 1. С. 68–75.
4. *Bernhardt H.A., Davis Jr.W., Shiflett C.H.* Radiation Effects of Alpha Particles on Uranium Hexafluoride. // In Proc. of International Conference on Peaceful Uses of Atomic Energy. Geneva, Switzerland, 1958. Report P/522.
5. *Орлов А.А., Кравченко А.В., Титов Е.С., Лебедев А.Я.* Обзор перспективных методов рециркуляции урана в ядерно-топливном цикле // Известия вузов. Физика. 2015. Т. 58. № 2/2. С. 35–40.
6. *Прусаков В.Н., Сазыкин А.А., Соснин Л.Ю., Утробин Д.В., Чельцов А.Н.* Коррекция изотопного состава регенерированного урана по ^{232}U центробежным методом с введением газа-носителя // Атомная энергия. 2008. Т. 105. № 3. С. 150–156.
7. *Смирнов А.Ю., Сулаберидзе Г.А., Невиница В.А., Дудников А.А., Шмелев А.Н.* Каскадные схемы в задачах исследования закономерностей изменения изотопного состава многократно регенерированного урана // Ядерная физика и инжиниринг. 2012. Т. 3. № 5. С. 396–403.
8. *Палкин В.А.* Очистка регенерированного урана в каскадах с обогащением ^{235}U до 5% // Атомная энергия. 2013. Т. 115. № 1. С. 28–33.
9. *Сулаберидзе Г.А., Борисевич В.Д., Цюаньсинь Се.* Квазиидеальные каскады с дополнительным потоком для разделения многокомпонентных изотопных смесей // Теоретические основы химической технологии. 2006. Т. 40. № 1. С. 7–16.
10. *Палкин В.А.* Разделение изотопов урана в каскаде с промежуточным отбором // Перспективные материалы. 2010. № 8. С. 11–14.
11. *Смирнов А.Ю., Сулаберидзе Г.А.* Обогащение регенерированного урана с одновременным разбавлением $^{232-236}$U природным сырьем и отвальным ураном // Атомная энергия. 2014. Т. 117. № 1. С. 36–42.
12. *Палкин В.А.* Применение квазиидеальных каскадов и операции разбавления для очистки регенерированного гексафторида урана // Атомная энергия. Т. 121. № 3. С. 152–157.
13. *Палкин В.А., Маслюков Е.В.* Очистка регенерированного урана в дополнительном отборе R-каскада и его обогащение в ординарном каскаде // Теоретические основы химической технологии. 2016. Т. 50. № 5. С. 711–717.
14. *Палкин В.А.* Очистка регенерированного урана в двухкаскадной схеме при использовании в одном из каскадов промежуточного отбора // Атомная энергия. 2016. Т. 121. № 1. С. 37–41.
15. *Сулаберидзе Г.А., Борисевич В.Д., Цюаньсинь Се.* О некоторых разделительных проблемах при вовлечении регенерированного урана в топливный цикл // Сб. докладов IX Всероссийской (Международной) научной конференции "Физико-химические процессы при селекции атомов и молекул". Россия, Звенигород, 4–8 октября 2004. С. 78–85.
16. *Сазыкин А.А.* Квазиидеальные каскады для разделения многокомпонентных смесей изотопов // Сб. докладов 5-й научной конференции "Физико-химические процессы при селекции атомов и молекул". Звенигород, ЦНИАТОМИНФОРМ, 2000. С. 51–57.
17. *De la Garza A., Garrett G.A., Murphy J.E.* Multicomponent isotope separation in cascades // Chemical Engineering Science. 1961. V. 15. P. 188–209.
18. *Смирнов А.Ю., Гусев В.Е., Сулаберидзе Г.А., Невиница В.А., Фомиченко П.А.* Обогащение регенерированного урана в двойном каскаде газовых центрифуг с его полным возвратом в воспроизводство топлива // Вестник НИЯУ МИФИ. 2018. Т. 7. № 6. С. 449–457.

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI", 2019, vol. 8, no. 6, pp. 498–506

LWR Fuel Cycle with Reprocessed Uranium Complete Recycling

V. A. Nevinitsa[b], A. Yu. Smirnov[a,b,#], G. A. Sulaberidze[a], V. E. Gusev[a], A. M. Pavlovichev[b], A. I. Scherenko[b], E. V. Rodionova[b], and V. Yu. Blandinsky[b]

[a] *National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia*

[b] *National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, 123098 Russia*

[#]*e-mail: a.y.smirnoff@rambler.ru*

Received September 18, 2019; revised September 25, 2019; accepted October 1, 2019

Abstract—In this study, we consider the problem of multiple recycling of uranium in the fuel cycle of thermal neutron reactors. The general approach to reusing recovered uranium extracted from spent fuel is related to its enrichment by the target fissile isotope ^{235}U in cascades of gas centrifuges. However, the reprocessed ura-

nium enrichment has difficulties related to $^{232, 236}U$ isotopes presence and a higher concentration of ^{234}U comparing to natural uranium. The low-enriched uranium product should meet the requirements on these even-numbered isotopes owing to radiation and neutron-physical characteristics. These conditions lead to obstacles for the complete return of the material to the cycle using the known enrichment schemes. This necessitates the search for new regeneration enrichment schemes that can solve this problem.
In this paper, we propose a new configuration based on the modified double cascade of gas centrifuges, which allows consuming the whole amount of reprocessed uranium during the enrichment process. It is preferable to use the proposed cascade scheme when we deal with multiple uranium recycling, starting from the second recycle round. It corresponds to sustainable fuel recovery for a fleet of thermal neutron reactors.

Keywords: reprocessed uranium, double cascade, multi-flow cascade, SNF, separation cascades theory

DOI: 10.1134/S2304487X19060075

REFERENCES

1. Pohitonov Yu.A., Kak mozhno snizit' stoimost' pererabotki obluchennogo topliva i obespechit' nadezhnuyu izolyaciyu vsekh othodov? [How can the cost of processing irradiated fuel be reduced and reliable isolation of all waste products ensured?], *Radiochemistry*, 2017, vol. 59, no. 6, pp. 481–487 (in Russian).
2. Kislov A.I., Titov A.A., Dmitriev A.M., Sintsov A.E., Radiacionnye aspekty ispol'zovaniya regenerirovannogo urana na OAO "MSZ" pri proizvodstve yadernogo topliva [Radiation aspects of the use of regenerated uranium at JSC "MSZ: in the production of nuclear fuel], *Journal of Nuclear and Radiation Safety*, 2012, special issue (in Russian).
3. Blandinskij V.Yu., Grol A.V., Dudnikov A.A. Nevinitsa V.A., Fomichenko P.A., Smirnov A.Yu., Sulaberidze G.A., Soglasovannyj podhod k modelirovaniyu vygoraniya pri obluchenii i molekulyarno-selektivnyh processov v razdelitel'nom kaskade dlya ocenki perspektiv razdel'nogo recikla regenerirovannogo urana topliva v legkovodnom reaktore [A coordinated approach to the simulation of fuel burnup during irradiation and molecular selective processes in the separation stage to assess the prospects of separate recycling of regenerated uranium in a light water reactor], *Questions of atomic science and technology, the series "Nuclear-Reactor Constants"*, 2018, no. 1, pp. 65–72 (in Russian).
4. Bernhardt H.A., Davis Jr.W., Shiflett C.H., Radiation Effects of Alpha Particles on Uranium Hexafluoride. In Proc. of International Conference on Peaceful Uses of Atomic Energy. Geneva, Switzerland, 1958. Report p. 522.
5. Orlov A.A., Kravchenco A.V., Titov E.S., Lebedev A.Ya., Obzor perspektivnyh metodov recirkulyacii urana v yaderno-toplivnom cikle [An overview of recycling methods uranium nuclear fuel cycle], *Russian Physics Journal*, 2015, vol. 58, no. 2/2, pp. 35–40 (in Russian).
6. Prusakov V.N., Sazykin A.A., Sosnin L.Yu., Utrobin D.V., Cheltsov A.N., Korrekciya izotopnogo sostava regenerirovannogo urana po 232U centrobezhnym metodom s vvedeniem gaza-nositelya [Correcting the isotopic composition of regenerated uranium with respect to ^{232}U by a centrifuge method with introduction of a carrier gas], *Atomic Energy*, 2008, vol. 105, no. 3, pp. 194–201 (in Russian).
7. Smirnov A.Yu., Sulaberidze G.A., Nevinitsa V.A., Dudnikov A.A., Shmelev A.N., Kaskadnye skhemy v zadachah issledovaniya zakonomernostej izmeneniya izotopnogo sostava mnogokratno regenerirovannogo urana [Cascade schemes in problems of studying the patterns of variation in the isotope composition of multiply regenerated uranium], *Nuclear physics and engineering*, 2012, vol. 3, no. 5, pp. 396–403 (in Russian).
8. Palkin V.A., Ochistka regenerirovannogo urana v kaskadah s obogashcheniem ^{235}U do 5% [Purification of regenerated uranium in cascades with enrichment of ^{235}U to 5%], *Atomic Energy*, 2013, vol. 115, no. 1, pp. 28–33 (in Russian).
9. Sulaberidze G.A., Borisevich V.D., Xie Q.X., Quasi-ideal cascades with an additional flow for separation of multicomponent isotope mixtures, *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2006, vol. 40, no. 1, pp. 5–14.
10. Palkin V.A., Razdelenie izotopov urana v kaskade s promezhutochnym otborom [Uranium Isotope Separation in a Cascade with Additional Product Flow], *Prospective Materials,* 2010, vol. 8, pp. 11–14 (in Russian).
11. Smirnov A.Yu., Sulaberidze G.A., Obogashchenie regenerirovannogo urana s odnovremennym razbavleniem $^{232-236}U$ prirodnym syr'em i otval'nym uranom [Enrichment of Regenerated Uranium with Simultaneous Dilution of $^{232-236}U$ by Raw and Waste Uranium], *Atomic Energy*, 2014, vol. 117, no. 1, pp. 36–42 (in Russian).
12. Palkin V.A., Primenenie kvaziideal'nyh kaskadov i operacii razbavleniya dlya ochistki regenerirovannogo geksaftorida urana [Application of Quaziideal Cascades and the Operation of Dilution for Purification of Regenerated Uranium Hexafluoride], *Atomic Energy*, 2016, vol. 121, no. 3, pp. 152–157 (in Russian).
13. Palkin V.A., Maslyukov E.V., Ochistka regenerirovannogo urana v dopolnitel'nom otbore R-kaskada i ego obogashchenie v ordinarnom kaskade [Purification of reprocessed uranium in an additional product flow of a matched abundance ratio cascade and its enrichment in an ordinary cascade], *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, 2016, vol. 50, no. 5, pp. 711–717 (in Russian).
14. Palkin V.A., Purification of Regenerated Uranium in a Two-Cascade Scheme Using Intermediate Product Extraction in One of the Cascades, *Atomic Energy*, 2016, vol. 121, no. 1, pp. 43–47.
15. Sulaberidze G.A., Borisevich V.D, Quanxin Xie., O nekotoryh razdelitel'nyh problemah pri vovlechenii rege-

nerirovannogo urana v toplivnyj cikl [On some separation problems involving the recycled uranium in the fuel cycle], *Sbornik dokladov IX mezhdunarodnoi nauchnoi conferentsii "Fiziko-khimicheskiye protsessy pri selektsii atomov i molekul", Rossiya, Zvenigorod* [Proc. of the 9th international scientific conference "Physico-chemical processes in the selection of atoms and molecules', Russia, Zvenigorod], 2004, pp. 78–85 (in Russian).

16. Sazykin A.A., Kvaziideal'nye kaskady dlya razdeleniya mnogokomponentnyh smesej izotopov [Quasidial cascades for separation of multicomponent mixtures of isotopes], *Sbornik dokladov V mezhdunarodnoi nauchnoi conferentsii "Fiziko-khimicheskiye protsessy pri selektsii atomov i molekul", Rossiya, Zvenigorod* [Proc. of the 5th scientific conference "Physico-chemical processes in the selection of atoms and molecules", Russia, Zvenigorod], 2000, pp. 51–57 (in Russian).

17. De la Garza A., Garrett G.A., Murphy J.E. Multicomponent isotope separation in cascades, *Chemical Engineering Sci*ence, 1961, vol. 15, pp. 188–209.

18. Smirnov A.Yu., Gusev V.E., Sulaberidze G.A., Nevinitsa V.A., Fomichenko P.A., Obogashchenie regenerirovannogo urana v dvojnom kaskade gazovyh centrifug s ego polnym vozvratom v vosproizvodstvo topliva [Reprocessed uranium re-enrichment in a double cascade of gas centrifuges providing its complete return to the nuclear fuel cycle], *Vestnik NIYaU MIFI*, 2018, vol. 7, no. 6, pp. 449–457 (in Russian).

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА “МИФИ”, 2019, том 8, № 6, с. 507–514

ТЕХНИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 546.798.24:546.73:546.72:546.261

УГЛЕРОДНЫЙ ФАКТОР В СОЕДИНЕНИЯХ КЮРИЯ С КОБАЛЬТОМ, ЖЕЛЕЗОМ. КАРБИДЫ КЮРИЯ

© 2019 г. В. М. Радченко[1], М. А. Рябинин[1], Т. А. Чернакова[1,*]

[1] *Научно-исследовательский институт атомных реакторов”, Димитровград, 433510, Россия*

**e-mail: taticher@mail.ru*

Поступила в редакцию 25.09.2019 г.
После доработки 07.10.2019 г.
Принята к публикации 15.10.2019 г.

Представлены результаты синтеза и рентгенографического исследования микрообразцов соединений кюрия-244 с кобальтом, железом, углеродом, полученных методом высокотемпературной конденсации паров металлического кюрия на соответствующие подложки. Изучено влияние углерода в системах Cm–Co и Cm–Fe. В системе кюрий-углерод обнаружены и рассчитаны параметры кристаллических структур карбидов кюрия Cm_2C_3 и Cm_3C, изоструктурные карбидам Am_2C_3 и Sm_3C. Установлено отсутствие взаимной растворимости компонентов систем при комнатной температуре. Показано влияние высокой альфа-активности нуклида ^{244}Cm на кристаллические структуры полученных соединений.

Ключевые слова: кюрий-244, высокотемпературная конденсация паров, карбиды, кристаллическая структура

DOI: 10.1134/S2304487X19060117

ВВЕДЕНИЕ

Исследования металлического состояния трансплутониевых элементов (ТПЭ), а также сплавов на основе ТПЭ, относятся к разряду уникальных не только в России, но и во всем мире. Получение экспериментального материала, с одной стороны очень затруднено вследствие малой доступности и высокой радиоактивности ТПЭ, а с другой стороны исключительно ценно для развития теоретических представлений об особенностях строения 4f (лантанидных) и 5f (актинидных) элементов и в целом о Периодической системе элементов Д.И. Менделеева. Теоретически и практически важным во всех случаях является влияние высокой активности нуклидов на физические, химические и технологичные свойства материалов и изделий на основе этих нуклидов.

В АО “ГНЦ НИИАР” многие годы проводят исследования по изучению способов получения, структур, важнейших химических и физико-химических свойств известных соединений ТПЭ, от нептуния до эйнштейния. Специалистами института опубликовано более 300 научных трудов по результатам работ, внесен значительный вклад в исследование фундаментальных свойств ТПЭ. В частности, в работе [1] авторы обобщили и систематизировали сведения о методах получения, основных свойствах и практическом применении металлов и сплавов ТПЭ. Однако данная монография не раскрывает информацию по получению и исследованию интерметаллических соединения кюрия-244 с такими элементами Периодической системы, как кобальт, железо и углерод. Описание получения подобных микрообразцов и результаты их исследований в литературных источниках практически отсутствуют. Именно эти вопросы отражены в настоящей работе.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Для получения образцов кюрия-244 выбран способ, ставший уже традиционным для получения интерметаллических соединений ТПЭ в АО “ГНЦ НИИАР”, а именно металлотермическое восстановление оксида кюрия торием с последующей конденсацией паров металла на соответствующие подложки. В исследовании сплавообразования кюрия с углеродом подложки для конденсации его паров представляли собой плоскопараллельные пластины из иридия с предварительно нанесенным на них слоем аморфного углерода толщиной ~1 мкм.

Установка и способ получения интерметаллидов и сплавов ТПЭ разработаны в ГНЦ НИИАР

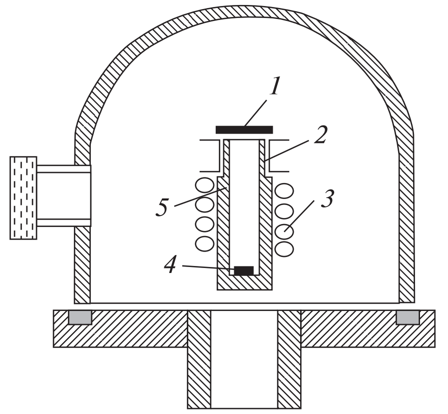

Рис. 1. Схема установки для получения металлического кюрия и его сплавов: *1* – подложка; *2* – тепловой экран; *3* – высокочастотный индуктор; *4* – смесь CmO_2+Th или испаряемый металл; *5* – тигель.

на подложках, не обладающих каталитической способностью в водороде [2, 3]. Центральная часть установки представлена на рис. 1. Процесс состоит из двух стадий: 1 – восстановление оксида, 2 – вакуумная перегонка полученного металла. Обе стадии проводят не только в высоком вакууме, но и при высокой температуре (вплоть до 2000°С), что обеспечивает достаточную скорость испарения трансплутониевого металла. Аппараты, в которых происходит процесс, изготавливают в основном из тантала, сочетающего в себе высокую жаропрочность, химическую инертность и очень низкую упругость паров с удовлетворительными технологическими свойствами.

Идентификацию новых соединений ТПЭ проводили рентгеновским дифрактометрическим методом, который позволяет: проводить структурный анализ исследуемого материала (определять координаты атомов в элементарной ячейке); определять параметры элементарной ячейки исследуемого вещества; определять состояния твердого тела (кристаллическое, аморфное, аморфное с кристаллическими включениями); исследовать фазовый состав вещества (качественный и количественный анализы).

Рентгенографическую идентификацию фаз выполняли с использованием "Рентгенометрической картотеки", издаваемой Объединенным комитетом по порошковым дифракционным стандартам [4].

Кристаллографические данные сравнивали с соответствующими данными по аналогичным лантанидным и первым актинидным соединениям: подобие структуры, "хорошее" соответствие параметров решетки обычно служат доказательством получения нового соединения. Кристаллическая структура новых соединений ТПЭ часто является их единственной характеристикой, тем не менее, она позволяет рассчитать по параметрам решетки объем элементарной ячейки, плотность, межатомные расстояния, определить тип связи, а также выявить закономерности изменения этих свойств вдоль актинидного ряда.

Содержание кюрия в образцах определяли альфа, гамма-спектрометрическим методами сравнением с эталонами.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

"Углеродный фактор" в системе кюрий–кобальт

Первые микрообразцы системы Cm–Co получены методом высокотемпературной вакуумной конденсации паров металлического кюрия-244 на плоские подложки кобальта получены. Исходный препарат кюрия содержал ~93% нуклида Cm-244 и менее 0.4% катионных примесей. Подложки для конденсации паров представляли собой полированные пластины из металлического кобальта (содержание кобальта не менее 99.98%). Содержание кюрия в образце 1 составило 0.079 мг, в образце 2 – 1.843 мг [5].

Идентификацию интерметаллических соединений системы Cm–Co проводили порефлексным сравнением исходных рентгенограмм с рентгенограммами образцов системы Cm–Ni [6]. На рентгенограммах образцов Cm–Ni присутствовали многочисленные интенсивные рефлексы интерметаллидов Cm_2Ni_{17} (до 72 рефлексов) и $CmNi_5$ (до 30 рефлексов), что помогло выявлению рефлексов интерметаллических соединений Cm_2Co_{17} и $CmCo_5$. Результаты расчетов параметров некоторых кристаллических решеток фаз, обнаруженных при исследовании образца 1, приведены в табл. 1.

Однако на исходной рентгенограмме образца 1, снятой через 4 ч после его получения, кроме решеток интерметаллических соединений присутствовали рефлексы, которые отнесли к следующим фазам: α- и β-Co; B-Cm_2O_3; карбид кюрия $\mathbf{Cm_2C_3}$, идентифицированной по аналогии с Th_2C_3 [4] и две кубических решетки типа шпинели (пространственная группа *Fd*3*m*), приписанных оксиду Co_3O_4; моноклинной решетки $\mathbf{ThC_2}$.

Рентгенограмму образца 2, записали через 4 ч после получения образца системы Cm–Co. На данной рентгенограмме идентифицированы решетки: α-Co; ГЦК β-Co; моноклинной решетке B-Cm_2O_3; ГЦК решетке ThO_2; двум гексагональным решеткам, интерпретированным как решетки интерметаллидов Cm_2Co_{17} и $CmCo_5$, а также кубической решетке с пространственной группой *Fd*3*m*, интерпретированной, по аналогии с решеткой $GdCo_2$ [4], как решетка интерметаллида $CmCo_2$ (фаза Лавеса), наличие углерода в системе

Таблица 1. Расчетные ПКР интерметаллидов и карбидов, обнаруженных на рентгенограммах образца 1 системы Cm–Co (0.079 мг ^{244}Cm)

Фаза	Решетка	τ, ч	*n*	Параметры решетки					*F*
				a, Å	*b*, Å	*c*, Å	β, град	*V*, Å^3	
Cm_2Co_{17}	Гекс ($P6_3/mcm$)	4	8	8.353(8)		8.067(6)		487(1)	2.3
$CmCo_5$	Гекс ($P6/mmm$)	4	6	4.917(3)		4.057(2)		84.9(2)	3.7
Cm_2C_3	Куб ($I\bar{4}3d$)	4	4	**8.323(6)**					4.4
		24	1	8.34(1)*					–
ThC_2	Мнкл ($C2/c$)	4	15	6.541(4)	4.259(3)	6.584(4)	103.96(3)	178.0(4)	2.7

Примечания (здесь и далее). В столбце “Решетка” в скобках указана пространственная группа кристаллической решетки. В скобках после значений параметров решетки приведены ошибки определения последнего знака. *n* – Число рефлексов в расчетном наборе. *F* – критерий адекватности: чем меньше F, тем лучше расчетная модель соответствует экспериментальному набору рефлексов $2\Theta_{эксп}$. * По рефлексу (211).

Таблица 2. Расчетные ПКР отдельных фаз, обнаруженных на рентгенограммах образца 2 системы Cm–Co (1.843 мг ^{244}Cm)

Фаза	Тип решетки	τ, сут	*n*	Параметры решетки					*F*
				a, Å	*b*, Å	*c*, Å	β, град	*V*, Å^3	
Cm_2Co_{17}	Гекс ($P6_3/mcm$)	0.16	8	8.378(7)		8.070(5)		491(1)	2.1
$CmCo_5$	Гекс ($P6/mmm$)	0.16	6	4.88(1)		4.08(4)		84(1)	20
$CmCo_2$	Куб ($Fd3m$)	0.16	6	7.242(2)				379.8(3)	13.2
ThC_2	Мнкл ($C2/c$)	0.16	10	6.523(3)	4.185(1)	6.603(3)	104.55(2)	174.5(2)	0.3
		5	7	6.54(1)	4.215(4)	6.62(7)	104.6(1)	177(1)	3.8
		7	5	6.52(7)	4.202(9)	6.62(2)	104.9(3)	175(4)	3.7

обозначилось в моноклинной решетке **ThC_2** (см. табл. 2).

Казалось бы, присутствие оксидов и оксикарбидов на рентгенограммах интерметаллических соединений ТПЭ было замечено и на более ранних исследованиях, но наличие карбида кюрия идентифицировано впервые в образце Cm–Co с содержанием 0.079 мг кюрия в образце. Причем во втором образце с большим содержанием кюрия данная находка не подтвердилась, кюрий полностью прореагировал с кобальтом, это новое интерметаллическое соединение $CmCo_2$ (фаза Лавеса) интерпретированное, по аналогии с решеткой $GdCo_2$ [4].

Полученный результат впервые заставил задуматься о возможности целенаправленного исследования кюрия с углеродом, с целью облегчения при дальнейшей работе исследования взаимодействия кюрия-244 с другими элементами Периодической системы, но интерес в пользу изучения интерметаллических соединений кюрия существенно перевешивал.

“Углеродный фактор” в системе кюрий–железо

Присутствие углерода замечено и в интерметаллической системе Cm–Fe [7]. “Углеродный фактор” проявился в следующем:

– тетрагонализация решетки α-Fe (подложки);

– появление карбида ThC_2 на подложке;

– увеличенный параметр ThO_2 (5.642 Å по сравнению с 5.600 Å для чистого ThO_2) – фактически это соединение имеет состав $Th(O, C)_2$;

– увеличенный атомный объем ДГПУ решетки α-Cm в результате внедрения в нее атомов углерода;

– увеличенный параметр CmO на исходной рентгенограмме образца и отсутствие некоторых рефлексов ГЦК решетки CmO на последующих рентгенограммах: не исключено что фактически мы видим отдельные рефлексы некубической решетки соединения CmOC (в банке данных име-

Таблица 3. Параметры решеток фаз на рентгенограмме 1 образца 2 (τ = 1 сут)

Фаза	Решетка	τ, сут	n[1]	Параметры решетки					F[3]
				a, Å	b, Å	c, Å	β, Å	V, Å^3	
$CmFe_2$	куб.	1	8	7.213(2)					13.0
		2	5	7.240(3)					19.6
		3	5	7.231(7)					5.5
Cm_2Fe_{17}	гекс.	1	12	8.406(3)		8.122(2)		497.0(5)	1.6
		2	9	8.377(5)		8.081(6)		491(1)	1.9
		3	9	8.401(8)		8.12(1)		496(2)	6.2
Fe(C)	тетр.	1	6	2.8635(5)[2]		2.9083(6)		23.85(1)	0.93
		2	5	2.858(1)		2.889(3)		23.60(4)	3.8
		3	5	2.860(1)		2.874(9)		23.51(9)	7.3
α-Fe	ОЦК	3	4	2.861(1)				23.42(3)	5.2
		4	3	2.862(2)					–
ThC_2	мнкл.	1	11	6.59(1)	4.245(2)	6.74(2)	102.77(7)	184(1)	3.4
		2	9	6.74(1)	4.230(3)	6.74(1)	103.2(1)	187.1(8)	2.6
		3	9	6.72(1)	4.244(5)	6.72(1)	103.3(2)	186.5(9)	5.6
		4	9	6.68(1)	4.245(4)	6.68(1)	101.9(1)	186(1)	3.5

ются сведения о возможном аналоге – соединении CeOC с моноклинной (при $T < 1333$ K) и тетрагональной (при $T > 1333$ K) решеткой).

Образец получали методом высокотемпературной вакуумной конденсации паров металлического кюрия-244 на плоскую подложку в виде фольги из железа "Армко". Исходный препарат кюрия содержал ~93% нуклида Cm–244 и менее 0.4% катионных примесей. Конденсацию кюрия на нее проводили при постепенном увеличении температуры испарения до ~2050°С. Установлено, что образец содержал 917 мкг кюрия [7].

На исходных рентгенограммах образца, записанных через 1 и 2 сут, зафиксировано – 50 и 34 рефлекса соответственно. С помощью компьютерного банка данных [4] идентифицированы кристаллические решетки, расчетные параметры которых представлены в табл. 3.

Практически все фазы, кристаллические решетки которых выявлены на исходной рентгенограмме образца Cm–Fe, являются неравновесными: они были получены при кратковременном высокотемпературном взаимодействии атомов Cm, Th, O и C с твердым кристаллическим Fe, за которым последовало быстрое охлаждение (закалка) образца. Последующее облучение (рентгенографируемой) поверхности образца α-частицами и ядрами отдачи при интенсивном альфа-распаде ^{244}Cm привело к своеобразному радиационному отжигу неравновесных фаз, их переходу в более равновесное состояние. Рентгенографически это за 4 сут выдержки проявилось следующим образом:

1. Распадался твердый раствор углерода в α-Fe, что проявлялось исчезновением "расщепления" рефлексов и уменьшением атомного объема решетки α-Fe.

2. Углерод уходил из ГЦК решетки $Th(O, C)_2$, что проявилось уменьшением ПКР соединения от a = 5.642 Å (τ = 1 сут) до a = 5.629 Å (τ = 4 сут), т.е. приближением ПКР к значению a = 5.600 Å, соответствующему чистому ThO_2.

3. В моноклинной решетке ThC_2 наблюдали сближение ПКР "a" и "c" с одновременным уменьшением объема ячейки (см. табл. 3); это может означать преобразование моноклинной решетки соединения в более равновесную (тетрагональную или гексагональную) модификацию.

4. Для гексагональной решетки интерметаллида Cm_2Fe_{17} в интервале 1–2 сут наблюдали уменьшение обоих ПКР; в интервале 2–3 сут – обратный процесс (см. табл. 3), а после 4 сут выдержки уже произошла рентгеноаморфизация решетки.

5. ПКР интерметаллида $CmFe_2$ изменялся следующим образом: a = 7.213(2) Å (τ = 1 сут) $\rightarrow$ $\rightarrow$ 7.240(3) Å (τ = 2 сут) $\rightarrow$ 7.231(7) Å (τ = 3 сут) $\rightarrow$ $\rightarrow$ аморфизация (τ = 4 сут выдержки).

В целом, фазы, в состав которых не входил ^{244}Cm, переходили в более равновесное состояние, а кристаллические решетки фаз, сдержавших ^{244}Cm, частично или полностью рентгеноаморфизировались.

Наличие "углеродного фактора" при приготовлении образцов систем Cm–Co и Cm–Fe объясняли возможным присутствием углерода, как в

Таблица 4. Расчетные ПКР карбидов кюрия, обнаруженных на рентгенограммах образцов системы Cm–C

Фаза	Решетка	τ, ч	*n*	Параметры решетки		*F*
				a, Å	*V*, Å^3	
Образец 1						
Cm_2C_3	Куб ($I\bar{4}3d$)	20	19	**8.3904(5)**	590.7(1)	0.9
		44	22	8.4177(4)	596.5(1)	0.4
		68	16	8.4351(5)	600.2(1)	0.5
		92	10	8.450(2)	603.4(4)	2.5
		308	2	8.437(2)	600.6(4)	–
Cm_3C	ГЦК	20	6	**5.172(2)**	138.3(2)	0.6
		44	5	5.21102(1)	141.504(1)	0.5
		68	4	5.210(2)	141.4(2)	14.5
		92	–	–	–	–
Образец 2						
Cm_2C_3	Куб ($I\bar{4}3d$)	24	5	**8.391(3)**	590.8(6)	1.0
		48	6	8.408(6)	594.4(1.3)	1.7
		72	5	8.41(1)	594.8(2.1)	5.1

самом тигле, так и в атмосфере остаточных газов (в виде летучих соединений). Отсутствие информации в литературных источниках о карбидах кюрия и желание получения достоверной информации о поведении углерода в процессе приготовления образцов с содержанием кюрия-244, привели к необходимости целенаправленного исследования взаимодействия кюрия-244 с углеродом.

Карбиды кюрия

Из литературных данных [8] известно три типа бинарных соединений трансурановых элементов (Np и Pu) с углеродом: моно-, полуторные и дикарбиды. Для Pu дополнительно идентифицирован также карбид состава Pu_3C_2 [9]. Для Am получен только полуторный карбид [10]. По соединениям Cm с углеродом никаких данных нет.

Исходный препарат кюрия содержал ~93% нуклида ^{244}Cm и менее 0.4% катионных примесей. Подложки для конденсации его паров представляли собой плоскопараллельные пластины из иридия с предварительно нанесенным на них слоем аморфного углерода толщиной ~1 мкм. Как и ожидалось, углерод прореагировал только с кюрием и не прореагировал с иридием, который имеет весьма высокую температуру плавления и не образует карбидов.

Было получено два образца. Образец 1 получали при более высокой температуре испарения кюрия. Содержание кюрия в нем составило 790 мкг. Образец 2 содержал 150 мкг кюрия.

На поверхности образца 1 зафиксированы интенсивные рефлексы кубической решетки пространственной группы $I\bar{4}3d$ с параметром a = = 8.3904(5) Å и рефлексы ГЦК решетки с параметром a = 5.172(2) Å (время выдержки образца 20 ч), а на поверхности образца 2 – рефлексы кубической решетки пространственной группы $I\bar{4}3d$ с параметром a = 8.391(3) Å (время выдержки образца 24 ч). Кроме того, на обеих исходных рентгенограммах присутствовали интенсивные рефлексы ГЦК решетки иридия, а также относительно слабые рефлексы моноклинной решетки Cm_2O_3 и рефлексы ГЦК решетки ThO_2 .

Результаты расчета параметров кристаллических решеток карбидов кюрия, обнаруженных при исследовании образцов Cm–C, представлены в табл. 4.

Необходимо отметить, что кубическая решетка с пространственной группой $I\bar{4}3d$ и с параметром a = 8.323(6) Å была обнаружена при исследовании системы Cm–Co на рентгенограмме одного из образцов. Уже тогда ее предположительно приписали решетке Cm_2C_3, образовавшейся в результате взаимодействия металлического кюрия с углеродосодержащими соединениями в вакуумной системе.

Идентификацию предполагаемых карбидов кюрия проводили методом сравнения наборов межплоскостных расстояний и интенсивностей рефлексов известных соединений лантанидов и актинидов с данными, полученными на рентгенограмме исследуемого образца, при этом учитывая разницу металлических радиусов лантанидов и америция.

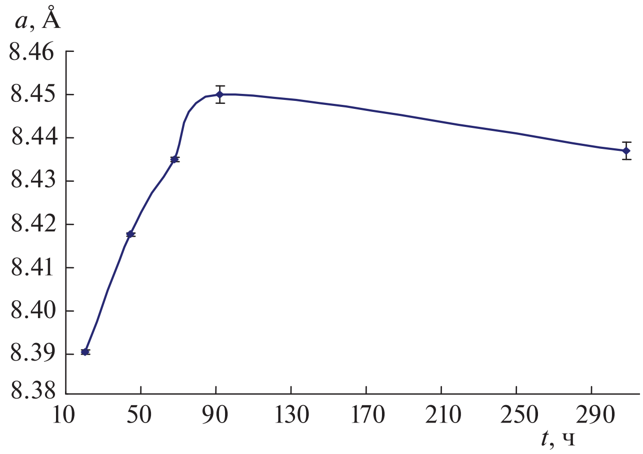

Рис. 2. Изменение параметра решетки карбида Cm_2C_3 при выдержке образца 1.

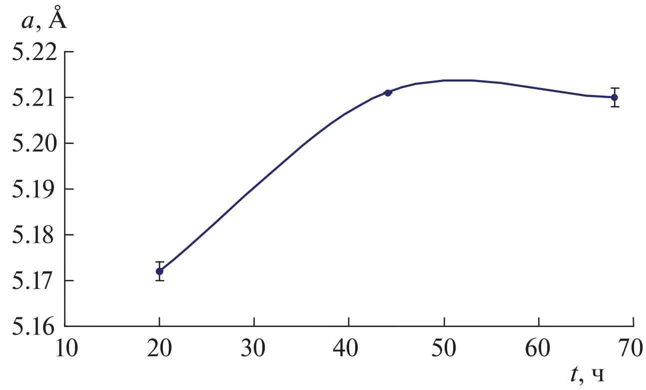

Рис. 3. Изменение параметра решетки карбида Cm_3C при выдержке образца 1.

Влияние интенсивного альфа-распада ^{244}Cm на кристаллические структуры Cm_2C_3 и Cm_3C при комнатной температуре можно проследить по результатам обработки пяти последовательно снятых рентгенограмм образца 1. Как и для других интерметаллических соединений ^{244}Cm, это влияние проявляется увеличением параметров решетки с одновременным ослаблением их интенсивности и последующим полным исчезновением, т.е. распуханием и последующей рентгеноаморфизацией решетки. Полной аморфизации кристаллической решетки Cm_2C_3 не произошло и через 13 сут выдержки, хотя на последней рентгенограмме осталось только два наиболее интенсивных рефлекса этой решетки. Зависимость изменения параметра решетки Cm_2C_3 от времени самооблучения приведена на рис. 2. Регистрируемое распухание решетки за первые 92 ч выдержки составило ≈2.4%. Аморфизация решетки карбида Cm_3C произошла значительно быстрее, чем у Cm_2C_3, – в интервале от 68 ч до 92 ч выдержки, а регистрируемое распухание решетки составило 2.1–2.4% за первые 68 ч выдержки образца (рис. 3). Непосредственно перед аморфизацией параметр решетки обоих карбидов явно уменьшается (см. рис. 2, 3).

Количество кюрия в образце 1 оказалось достаточным для образования как карбида Cm_2C_3 (атомная доля кюрия 40%), так и карбида Cm_3C (атомная доля кюрия 75%). Содержание кюрия в образце 2 оказалось существенно меньше, и он весь прореагировал с углеродом с образованием только соединения Cm_2C_3 (на карбид Cm_3C кюрия не хватило).

Если бы в системе Cm–C существовал карбид CmC или карбид CmC_2, то рефлексы одного из этих соединений обязательно присутствовали бы на рентгенограмме образца 2. Никаких “посторонних” рефлексов на рентгенограммах обоих полученных образцов не обнаружено. Это может означать, что других карбидов, кроме двух идентифицированных в настоящей работе, в системе Cm–C не существует.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом высокотемпературной вакуумной конденсацией паров металлического кюрия-244 на подложке из иридия с предварительно нанесенным на их поверхность слоем аморфного углерода (толщиной 1 мкм) получены первые образцы, предназначенные для исследования системы Cm–C. Образец 1 содержал 790 мкг кюрия, образец 2–150 мкг. Рентгенодифрактометрическим методом идентифицированы **новые, ранее не известные** соединения в системе кюрий–углерод: $\mathbf{Cm_2C_3}$ кубическая решетка (пространственная группа $I\bar{4}3d$), $\mathbf{CmC_3}$ кубическая решетка (пространственная группа Fm3m).

Изучено влияние альфа-распада кюрия-244 на полученные кристаллические структуры соединений кюрия с углеродом. Показано, что под действием интенсивного альфа-распада ^{244}Cm решетки обоих карбидов распухают, а затем полностью рентгеноаморфизируются. Регистрируемое распухание решетки Cm_2C_3 составило 2.4% за 92 ч выдержки, а распухание решетки Cm_3C – 2.1–2.4% за 68 ч. Обнаружено также небольшое распухание ГЦК решетки иридия под действием альфа-частиц ^{244}Cm, находящегося на его поверхности.

По результатам общего анализа предположено, что в системе Cm–C существуют только два карбида, которые и обнаружены в настоящей работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Радченко В.М., Рябинин М.А., Топоров Ю.Г.* Металловедение трансплутониевых металлов. Димитровград: ОАО "ГНЦ НИИАР", 2009. 200 с.
2. *Радченко В.М., Селезнев А.Г., Рябинин М.А. и др.* Синтез и изучение бинарных соединений актиноидов и лантаноидов. XVII. Исследование сплавов ^{244}Cm с платиной, иридием и родием, полученных конденсацией паров металлического кюрия // Радиохимия, 1994. Т. 36. Вып. 4. С. 229–303.
3. Пат. 2030804 Российская Федерация. Способ изготовления активной части радионуклидного источника / В.М. Радченко, А.Г. Селезнев, М.А. Рябинин и др. // Бюллетень изобретений. 1995. № 7.
4. X-ray Diffraction Data Cards Joint Commitee on Powder Diffraction Standards. Amer. Soc. for Testing Materials (ASTM). Philadelphia, 1999 и др. годы.
5. *Радченко В.М., Селезнев А.Г., Дрозник Р.Р. и др.* Синтез и изучение бинарных соединений актиноидов и лантаноидов. XXIV. Сплавы кюрия с кобальтом // Радиохимия, 2004. Т. 46. Вып. 1. С. 3–6.
6. *Радченко В.М., Селезнев А.Г., Рябинин М.А. и др.* Синтез и изучение бинарных соединений актиноидов и лантаноидов. XX. Интерметаллиды кюрия с никелем // Радиохимия, 1995. Т. 37. Вып. 4. С. 317–321.
7. *Радченко В.М., Рябинин М.А., Селезнев А.Г. и др.* Синтез и изучение бинарных соединений актиноидов и лантаноидов. XXVI. Сплавы Cm с Fe // Радиохимия, 2004. Т. 46. Вып. 5. С. 385–388.
8. *Мефодьева М.П., Крот Н.Н.* Соединения трансурановых элементов. М.: Наука, 1987. 302 с.
9. *Лычев А.А., Маширов Л.Г., Смолин Ю.И. и др.* // Радиохимия. 1980. Т. 22. № 1. С. 43–48.
10. *Зубарев В.Г., Крот Н.Н.* // Радиохимия. 1983. Т. 25. № 5. С. 631–638.

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI", 2019, vol. 8, no. 6, pp. 507–514

Carbon Factor in Compounds of Curium with Cobalt, Iron. Curium Carbides

V. M. Radchenko[a,†], M. A. Ryabinin[a], and T. A. Chernakova[a,#]

[a] *JSC "SSC – Research Institute of Atomic Reactors", Dimitrovgrad, 433510 Russia*

[#]*e-mail: taticher@mail.ru*

Received September 25, 2019; revised October 7, 2019; accepted October 15, 2019

Abstract—This paper presents the results of production and radiographic examination of micro-samples of curium-244 compounds with ion, cobalt and carbon, prepared by high temperature condensation of metal curium vapor onto corresponding substrates. The effect of carbon in the Cm–Co and Cm–Fe systems was studied. In the Cm–C system carbides Cm_2C_3 and Cm_3C with a cubic lattice were detected, which were isostructural with regard to carbides Am_2C_3 and Sm_3C. The absence of mutual solubility of system components at room temperature was established. The effect of high alpha-activity of ^{244}Cm nuclide on the crystal structure of the compounds obtained was demonstrated.

Keywords: curium-244, high temperature condensation of metal, carbides, the crystal structure

DOI: 10.1134/S2304487X19060117

REFERENCES

1. Radchenko V.M., Ryabinin M.A., Toporov Yu.G. *Metallovedenie transplutonievykh metallov* [Metallurgy of transplutonium metals]. Dimitrovgrad: JSC "SSC RIAR", 2009, 200 p.
2. Radchenko V.M., Seleznev A.G., Ryabinin M.A. et al. Synthesis and study of binarycompounds of actinides and lanthanides. XVII. A study of 244Cm alloys with platinum, iridium, and rhodium obtained by prepared by condensation of curium metal vapors. *Radiokhimiya*, 1994, vol. 36, no. 4. pp. 229–303.
3. Radchenko V.M., Seleznev A.G., Ryabinin M.A. et al. A method of manufacturing the active part of a radionuclide source. Patent RF no. 2030804, *Bull. Izobret.*, 1995, no. 7.
4. X-ray Diffraction Data Cards Joint Commitee on Powder Diffraction Standards. Amer. Soc. for Testing Materials (ASTM). Philadelphia, 1999 e.a.

5. Radchenko V.M., Seleznev A.G., Droznik R.R. et al. Synthesis and study of binary compounds of actinides and lanthanides. XXIV. Alloys of Cm with Co. *Radiokhimiya*, 2004, vol. 46, no. 1. pp. 3–6.
6. Radchenko V.M., Seleznev A.G., Ryabinin M.A. et al. Synthesis and study of binary compounds of actinides and lanthanides. XX. Curium alloys with Nickel. *Radiokhimiya*, 1995, vol. 37, no. 4. pp. 317–321.
7. Radchenko V.M., Ryabinin M.A., Seleznev A.G., Gorbunov S.I., Chernakova T.A., Nagaitsev V.G. Synthesis and study of binary compounds of actinides and lanthanides: XXVI. Alloys of Cm with Fe. *Radiokhimiya*, 2004, vol. 46. no. 5. pp. 417–420.
8. Mefod'eva M.P., Krot N.N. *Soedineniya transuranovykh elementov* [Compounds of transuranic elements]. Moscow: Nauka, 1987, 330 p.
9. Lychev A.A., Mashirov L.G., Smolin Yu.I., et al. *Radiokhimiya*, 1980, vol. 22, no 1, pp. 43–48.
10. Zubarev V.G., Krot N.N. *Radiokhimiya*, 1983, vol. 25, no. 5, pp. 631–638.

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА “МИФИ”, 2019, том 8, № 6, с. 515–532

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ

УДК 517.9

КАЧЕСТВЕННЫЕ ОСОБЕННОСТИ ЧИСЛЕННОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ ЗАДАЧ С ПОГРАНИЧНЫМ СЛОЕМ С ПОМОЩЬЮ НЕЛОКАЛЬНЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ

© 2019 г. А. Д. Полянин[1,2,3], И. К. Шингарева[4]

[1] *Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва, 119526, Россия*

[2] *Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409, Россия*

[3] *Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Москва, 105005, Россия*

[4] *Университет Сонора, Эрмосильо, штат Сонора, 83000, Мексика*

**e-mail: polyanin@ipmnet.ru*

***e-mail: inna@mat.uson.mx*

Поступила в редакцию 27.08.2019 г.
После доработки 27.08.2019 г.
Принята к публикации 01.10.2019 г.

Описаны качественные особенности численного интегрирования двухточечных краевых задач погранслойного типа с помощью нелокальных преобразований. Такие преобразования, которые иногда называются также преобразованиями типа Сундмана, задаются с помощью вспомогательного дифференциального уравнения и позволяют “растягивать” область пограничного слоя (после чего уже можно применять любые адекватные численные методы с постоянным шагом). Приведены имеющие точные решения в элементарных функциях многопараметрические нелинейные сингулярно возмущенные краевые задачи с малым параметром, которые можно использовать для тестирования различных численных методов с неравномерной сеткой. Особое внимание уделяется исследованию наиболее сложных для численного анализа краевых задач, которые имеют немонотонные решения или вырождаются на границе пограничного слоя. Сопоставление численных и точных решений показывает высокую эффективность метода нелокальных преобразований в краевых задачах с пограничным слоем.

Ключевые слова: дифференциальные уравнения с малым параметром, сингулярно возмущенные краевые задачи, пограничный слой, нелокальные преобразования, точные и численные решения

DOI: 10.1134/S2304487X19060099

1. ВВЕДЕНИЕ

Сингулярно возмущенные линейные и нелинейные краевые задачи с малым параметром ε часто используются для математического моделирования различных явлений и процессов в науке и технике (см., например, [1–8]). Важной характерной качественной особенностью таких задач является то, что при $\varepsilon = 0$ порядок рассматриваемого дифференциального уравнения уменьшается и нельзя удовлетворить некоторым граничным условиям.

Решения сингулярно возмущенных краевых задач имеют большие градиенты в узких областях (пограничных слоях), что приводит к потере сходимости стандартных конечно-разностных методов и сильно ограничивает их область применимости для интегрирования такого рода задач. Первыми работами, где в полной мере говорилось о неэффективности классических конечно-разностных схем и необходимости разработки специальных схем, обладающих свойством сходимости независимо от значения малого параметра, были публикации [9, 10], в которых были заложены основы двух разных подходов к решению краевых задач с пограничным слоем. В [9] была предложена классическая центрально-разностная схема с сеткой, сгущающейся вблизи пограничных слоев. В [10] была использована схема экспоненциальной подгонки, коэффициенты которой подобраны так, чтобы на погранслойной составляющей решения схема была асимптотически точной.

Различные методы численного интегрирования линейных и нелинейных сингулярно возмущенных краевых задач рассматриваются, например, в [11–30]. Для численного решения таких задач многие авторы используют методы с кусочно-равномерной сеткой, которая характеризуется малым шагом в пограничном слое и большим шагом за его пределами (см., например, [13, 15, 22–24, 27, 30]). Важно отметить, что в методах, основанных на использовании кусочно-равномерной сетки (а также методов, разработанных в [9, 10]), явно или неявно учитывается априорная информация о структуре и скорости затухания асимптотических решений в пограничном слое.

В данной статье для численного интегрирования сингулярно возмущенных краевых задач с одним пограничным слоем на начальном этапе используются нелокальные преобразования, которые на заключительном этапе позволяют интегрировать редуцированную задачу стандартными численными методами с равномерным шагом. Основные идеи этого метода были изложены в [31, 32]. В данной работе исследуются наиболее сложные для численного анализа краевые задачи, которые имеют немонотонные решения или/и имеет место вырождение на границе пограничного слоя. Предложено несколько новых эффективных нелокальных преобразований.

Замечание 1. Нелокальные преобразования использовались в [33–38] для численного интегрирования нелинейных задач Коши, которые имели монотонные и немонотонные решения с обострением (такие задачи характеризуются очень большими градиентами в окрестности сингулярной точки, положение которой заранее неизвестно). Сравнение точных и численных решений ряда тестовых задач для дифференциальных уравнений первого, второго, третьего и четвертого порядков, а также систем уравнений, показало высокую эффективность этого метода для численного интегрирования задач с обострением.

Замечание 2. Нелокальные преобразования специального вида использовались в [39–41] для получения точных решений, первых интегралов, и линеаризации обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка.

2. КАЧЕСТВЕННЫЕ ОСОБЕННОСТИ СИНГУЛЯРНО ВОЗМУЩЕННЫХ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ С МАЛЫМ ПАРАМЕТРОМ

2.1. Модельная линейная трехпараметрическая краевая задача. Точные и асимптотические решения. Область пограничного слоя

Напомним качественные особенности краевых задач, имеющих решения погранслойного типа, на примере простой модельной задачи.

Тестовая задача 1. Рассмотрим двухточечную краевую задачу для линейного обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами

$$\begin{gathered}\varepsilon y''_{xx} + y'_x + y = 0 \quad (0 < x < 1);\\ y(0) = a, \quad y(1) = b,\end{gathered} \tag{1}$$

где a, b, ε — свободные определяющие параметры. В этой задаче при $\varepsilon \to 0$ ($\varepsilon > 0$) пограничный слой образуется вблизи точки $x = 0$.

В зависимости от значений свободных параметров задача (1) может иметь как монотонные, так и немонотонные решения. Точное решение этой задачи определяется формулами

$$\begin{gathered}y = \frac{ae^{\lambda_2} - b}{e^{\lambda_2} - e^{\lambda_1}} e^{\lambda_1 x} + \frac{b - ae^{\lambda_1}}{e^{\lambda_2} - e^{\lambda_1}} e^{\lambda_2 x},\\ \lambda_1 = \frac{1}{2}\varepsilon^{-1}(-1 - \sqrt{1 - 4\varepsilon}),\\ \lambda_2 = \frac{1}{2}\varepsilon^{-1}(-1 + \sqrt{1 - 4\varepsilon}).\end{gathered} \tag{2}$$

Для малых ε справедливы приближенные соотношения $\lambda_1 \simeq -\varepsilon^{-1}$, $\lambda_2 \simeq -1$, $y'_x(0) \simeq \varepsilon^{-1}(be - a)$, а соответствующее асимптотическое решение задачи (1) имеет вид

$$y_a \simeq (a - eb)e^{-x/\varepsilon} + be^{1-x}. \tag{3}$$

Для конкретности далее будем полагать, что $a \geq 0$, $b \geq 0$. Если $a > eb$, то функция (3) монотонно убывает. Если $a < eb$, то функция (3) монотонно (и очень быстро) возрастает в узкой области $0 \leq x < x_*$, где

$$x_* \simeq \varepsilon \ln\left[\frac{1}{\varepsilon}\left(1 - \frac{a}{eb}\right)\right], \quad y_* \simeq eb, \tag{4}$$

а в оставшейся области $x_* \leq x \leq 1$ решение монотонно (и достаточно медленно) убывает.

Точные решения (2) задачи (1) показаны сплошными линиями на рис. 1 для двух наборов численных значений определяющих параметров: *a*) $a = 1$, $b = 0$, $\varepsilon = 0.005$ и *b*) $a = 0$, $b = 1$, $\varepsilon = 0.005$. Для второго набора значений решение в области $0 \leq x \leq x_* \approx 0.026709653$ быстро возрастает (от нуля до максимального значения $y_* \approx 2.646247631$), а в области $x_* \leq x \leq 1$ медленно убывает; в этом случае максимум разности между асимптотическим решением (3) и точным решением (2) на всем интервале $0 \leq x \leq 1$ равен 0.072034196 (а относительная погрешность равна 0.027221260).

При применении прямых численных методов в таких задачах, чтобы учесть особенности решения в области пограничного слоя, необходимо взять достаточно много точек в малой окрестности левой границы. Поэтому использование равномерных сеток во всей области изменения независимой переменной x при $\varepsilon \to 0$ связано с необходимостью разбиения области $0 \leq x \leq 1$ на большое число интервалов интегрирования.

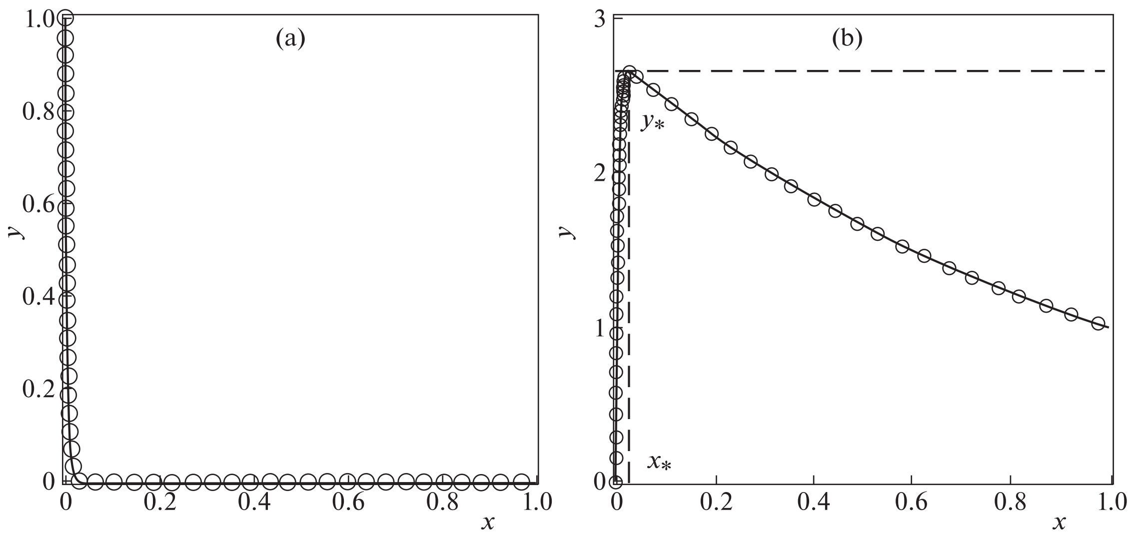

Рис. 1. Точные решения (2) задачи (1) (сплошные линии) и численные решения преобразованной задачи (11) (точки) при $g = (1 + |z| + |f|)^{1/2}$ для двух наборов численных значений определяющих параметров: *a*) $a = 1,\ b = 0,\ \varepsilon = 0.005$; *b*) $a = 0,\ b = 1,\ \varepsilon = 0.005$.

2.2. Порядковое соотношение между первой и второй производной

Важно отметить, что производные от решения (2) на левой границе очень велики при $\varepsilon \to 0$:

$$(y_a)'_x|_{x=0} \simeq -\varepsilon^{-1}(a - eb), \quad (y_a)''_x|_{x=0} \simeq \varepsilon^{-2}(a - eb). \quad (5)$$

Например, при $a = 0,\ b = 1,\ \varepsilon = 0.005$, имеем $(y_a)'_x|_{x=0} \simeq 543.656$.

Пусть $|a - eb| = O(1)$. Исключив ε из (5), получим порядковое соотношение

$$|y''_x| = O(|y'_x|^2). \quad (6)$$

В [31, 32] было показано, что порядковое соотношение между производными (6) носит достаточно общий характер и справедливо в области пограничного слоя, если главный член асимптотического разложения решения при $\varepsilon \to 0$ имеет вид $y = \varphi(x/\delta)$, где $\varphi = \varphi(z)$ – гладкая функция, имеющая ограниченные и не обращающиеся в нуль производные в некоторой окрестности точки $z = 0$, а $\delta = \delta(\varepsilon)$ – функция, обладающая свойством $\delta \to 0$ при $\varepsilon \to 0$.

3. ЧИСЛЕННОЕ ИНТЕГРИРОВАНИЕ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ, ОСНОВАННОЕ НА НЕЛОКАЛЬНЫХ ПРЕОБРАЗОВАНИЯХ

3.1. Общее описание метода решения

Будем рассматривать двухточечные задачи для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с граничными условиями первого рода, которые в безразмерных переменных имеют вид

$$y''_{xx} = f(x, y, y'_x) \quad (0 < x < 1); \quad (7)$$

$$y(0) = a, \quad y(1) = b, \quad (8)$$

где функция f может зависеть от малого параметра $\varepsilon > 0$. Для сингулярно возмущенных краевых задач правая часть рассматриваемого уравнения имеет вид $f = \varepsilon^{-1}F(x, y, y'_x, \varepsilon)$, где $F(x, y, z, 0)$ – гладкая функция трех аргументов.

Нелокальная переменная ξ вводится с помощью дифференциального уравнения первого порядка и начального условия [31, 32]:

$$\xi'_x = g(x, y, y'_x), \quad \xi(0) = 0, \quad (9)$$

где $g = g(x, y, y'_x)$ – регуляризующая функция, которая может варьироваться.

Представим уравнение второго порядка (7) в виде эквивалентной системы двух уравнений первого порядка

$$y'_x = z, \quad z'_x = f(x, y, z). \quad (10)$$

Используя (9), перейдем от x к новой независимой переменной ξ в (10) и (8). В результате исходная краевая задача (7)–(8) преобразуется к следующей задаче для системы из трех уравнений:

$$x'_\xi = \frac{1}{g(x,y,z)}, \quad y'_\xi = \frac{z}{g(x,y,z)},$$
$$z'_\xi = \frac{f(x,y,z)}{g(x,y,z)} \quad (0 < \xi < \xi_1); \tag{11}$$
$$x(0) = 0, \quad y(0) = a, \quad y(\xi_1) = b,$$

где значение ξ_1 определяется в процессе вычислений из условия $x(\xi_1) = 1$.

При подходящем выборе регуляризующей функции $g = g(x,y,z)$ задачу (11) можно решать методом пристрелки с помощью стандартных численных методов с постоянным шагом по ξ [42–47].

3.2. Регуляризующие функции. Асимптотическое условие. Примеры

Для численного решения краевых задач будем использовать регуляризующие функции вида [31, 32]:

$$g = G(|z|, |f|) \equiv G(|y'_x|, |y''_{xx}|), \tag{12}$$

где $f = f(x,y,z)$ – правая часть уравнения (7) и $z = y'_x$. На функцию $G = G(u,v)$ накладываем условия

$$G > 0; \quad G_u \ge 0, \quad G_v \ge 0;$$
$$G \to \infty \quad \text{при} \quad u + v \to \infty; \quad G(0,0) = 1, \tag{13}$$

где $u \ge 0$, $v \ge 0$. Условие нормировки – последнее соотношение в (13) – не является обязательным. При использовании регуляризующих функций вида (12) для плоских и прямолинейных участков кривой $y = y(x)$, на которых $y'_x = \text{const}$, фиксированный размер шага по ξ дает фиксированный размер шага по x. Отметим, что если уравнение (7) является автономным (т. е. не зависит явно от x), а регуляризующая функция выбирается в виде (12), то второе и третье уравнения системы (11) образуют замкнутую подсистему, которая интегрируется независимо от первого уравнения.

Для сингулярно возмущенных краевых задач (7)–(8) с малым параметром при старшей производной, у которых правая часть уравнения (7) имеет вид

$$f(x,y,y'_x) = \varepsilon^{-1} F(x,y,y'_x),$$

при выборе регуляризующих функций помимо условий (12)–(13) следует учитывать дополнительные соображения. Если положить $g = 1$ (т.е. не использовать нелокальные преобразования) и ε устремить к нулю, то правые члены двух последних уравнений системы (11) в области пограничного слоя будут стремиться к бесконечности, поскольку $|z| \to \infty$ и $|f| \sim z^2$ (см. порядковое соотношение (6)). Указанное обстоятельство существенным образом усложняет численное интегрирование краевой задачи при $g = 1$ и приводит к необходимости пропорционально измельчать шаг сетки при уменьшении ε.

Избежать измельчения сетки при $\varepsilon \to 0$ и работать с постоянным шагом по ξ можно путем использования регуляризующих функций $g \ne \text{const}$, удовлетворяющих асимптотическому условию

$$|z|/g = O(1) \quad \text{при} \quad \varepsilon \to 0 \tag{14}$$

(в этом случае правая часть второго уравнения системы (11) не будет иметь сингулярностей при малых ε, а третье уравнение этой системы в области пограничного слоя будет иметь существенно меньшую сингулярность, чем при $g = 1$). В частности, можно брать регуляризующие функции, имеющие асимптотики

$$g \to m_1|z| \quad \text{при} \quad |z| \to \infty$$
$$\text{или} \quad g \to m_2|f|^{1/2} \quad \text{при} \quad |f| \to \infty, \tag{15}$$

где m_1 и m_2 – положительные константы порядка единицы. Отметим, что простые регуляризующие функции биноминального вида

$$g = 1 + |z| \quad \text{или} \quad g = (1 + |f|)^{1/2} \tag{16}$$

имеют асимптотики (15) при $m_1 = m_2 = 1$ и удовлетворяют условию нормировки в (13). Использование регуляризующих функций (16) позволяет подавить неограниченный рост правой части второго уравнения системы (11) в области пограничного слоя при $\varepsilon \to 0$ и уменьшить (по сравнению с $g = 1$) правую часть третьего уравнения. Далее, на конкретных примерах будет показано, что регуляризующие функции вида (16) имеют ограниченную область применения.

На практике целесообразно использовать регуляризующие функции смешанного вида

$$g = 1 + k_1|z| + k_2|f|^{1/2},$$
$$g = (1 + k_1 z^2 + k_2|f|)^{1/2}, \tag{17}$$

которые удовлетворяют асимптотическому условию (14), а также условию нормировки в (13). Формулы (17) включают в себя два параметра $k_1 \ge 0$ и $k_2 \ge 0$, которые могут варьироваться (при $k_1 + k_2 = O(1)$). Далее будет показано, что регуляризующие функции вида (17) являются более универсальными, чем функции (16), и обычно приводят к гораздо более точным численным решениям.

Эффективными также являются более сложные регуляризующие функции

$$g = 1 + R_1, \quad R_1 = \max(|z|, |f|^{1/2});$$
$$g = (1 + R_2)^{1/2}, \quad R_2 = \max(z^2, |f|). \tag{18}$$

В разд. 4 и 5 будет проведено сопоставление эффективности регуляризующих функций (16)–(18) путем численного интегрирования линейных и нелинейных сингулярно возмущенных тестовых краевых задач с малым параметром, которые допускают точные решения.

3.3. Дополнительные пояснения и комментарии

1°. Из уравнения (9) и формулы (12), для малых приращений аргумента Δx, пренебрегая членами порядка $o(\Delta x)$, получим

$$\Delta\xi = G(|z|,|f|)\Delta x,$$

где $z = y'_x$ и $f = y''_{xx}$. Отсюда следует, что выбор постоянного шага по новой переменной $\Delta\xi = h$ эквивалентен использованию переменного шага для исходной независимой переменной $\Delta x = h/G$. Предположим, что $G = G(u) > 0$, $G(0) = 1$, $G'_u > 0$ и $u = |z|$. Тогда рост производной z с увеличением x приводит к уменьшению шага Δx. Таким образом, применение нелокальных преобразований соответствует автоматическому выбору переменного шага по x. При использовании формул (16)–(18) шаг Δx мал в области пограничного слоя.

2°. В данной работе используется комбинация классического явного метода Рунге–Кутты четвертого порядка аппроксимации с фиксированным шагом и метода пристрелки, реализованных в среде Maple [46]. Для этого численно интегрируется вспомогательная задача Коши, описываемая преобразованными уравнениями (11) с первыми двумя условиями в левой крайней точке и дополнительным начальным условием $z(0) = s$. В качестве начального пристрелочного значения берется $s = s_0 \simeq \varepsilon^{-1}$. Искомое значение параметра s определяется, когда решение удовлетворит граничному условию в крайней правой точке $x = 1$ (см. последнее граничное условие в (11)).

3°. После применения к рассматриваемой краевой задаче нелокального преобразования на заключительном этапе можно использовать любые эффективные численные методы с постоянным шагом (например, явные и неявные методы Рунге–Кутты, явные методы Адамса–Башфорта и неявные методы Адамса–Моултона [48–50]).

4. СИНГУЛЯРНО ВОЗМУЩЕННЫЕ ЛИНЕЙНЫЕ КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ. СРАВНЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ И АНАЛИТИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ

4.1. Линейная тестовая задача. Численные решения, полученные с использованием различных регуляризующих функций

Сначала проиллюстрируем характерные особенности метода нелокальных преобразований на линейных краевых задачах.

На рис. 1 точками показаны результаты численного решения преобразованной задачи (11), использованной для решения исходной задачи (1), для $f = -\varepsilon^{-1}(z + y)$ с регуляризующей функцией $g = (1 + |z| + |f|)^{1/2}$, которые получены методом стрельбы с постоянным шагом $h = 0.01$ для двух наборов числовых значений определяющих параметров: $a = 1$, $b = 0$, $\varepsilon = 0.005$ (монотонное решение) и $a = 0$, $b = 1$, $\varepsilon = 0.005$ (немонотонное решение). Видно, что имеет место хорошее совпадение численных и точных решений (точные решения определяются по формуле (2) и представлены сплошными линиями).

В табл. 1 приведены максимальные абсолютные погрешности численных решений преобразованной задачи (11), используемой для интегрирования исходной задачи (1), при $a = 1$, $b = 0$, $\varepsilon = 0.005$ и $a = 0$, $b = 1$, $\varepsilon = 0.005$ для трех шагов h и восьми различных регуляризующих функций g. Для сравнения аналогичные данные указаны также для случая $g = 1$, который соответствует прямому численному решению (без использования преобразований) с тем же шагом по x. Видно, что семь регуляризующих функций (№№ 2–8) позволяют получать численные решения во всей области с высокой точностью даже при достаточно большом шаге (по ξ), равном $h = 0.1$.

В табл. 2 приведены максимальные абсолютные погрешности численных решений преобразованной задачи (11), используемой для интегрирования исходной задачи (1), при $a = 1$, $b = 0$, $\varepsilon = 0.005$ и $a = 0$, $b = 1$, $\varepsilon = 0.005$ для различного числа точек сетки $N = \xi_1/h$ (здесь ξ_1 – длина интервала численного интегрирования преобразованных уравнений).

Сравним, например, максимальные абсолютные погрешности численных решений, полученных для данного $\varepsilon = 0.005$ с регуляризующими функциями № 7 и № 9 (последнее решение получено без использования преобразований) с одинаковым числом точек сетки. В этом случае при $N = 100$ использование нелокального преобразования позволяет повысить точность численного решения более чем в 856–1267 раз, а при $N = 500$ – приблизительно в 853–3016 раз.

Видно, что для всех регуляризующих функций, рассмотренных в табл. 2, точность численного интегрирования задачи (1) с монотонным решением для $a = 1$, $b = 0$ значительно выше точности численного интегрирования задачи (1) с немонотонным решением для $a = 0$, $b = 1$.

Также видно, что функция № 1 малоэффективна для немонотонного решения. Это связано с тем, что вблизи пограничного слоя наблюдается резкий экстремум в точке $x = x_*$ (см. рис. 1*b*), где производная обращается в нуль: $y'_x|_{x=x_*} = z|_{x=x_*} = 0$. Используя асимптотическую формулу (3) при

Таблица 1. Сравнение точности численных решений преобразованной задачи (11), которая используется для решения исходной задачи (1), для различных регуляризующих функций g при $\varepsilon = 0.005$ для трех шагов h. Здесь $R_1 = \max(|z|, |f|^{1/2})$ и $R_2 = \max(z^2, |f|)$

Максимальная абсолютная погрешность численных решений для $a = 1$, $b = 0$				
№	Регуляризующая функция	Шаг 0.1	Шаг 0.05	Шаг 0.01
1	$g = 1 + \|z\|$	0.017119347	0.006702741	0.000137030
2	$g = (1 + \|f\|)^{1/2}$	0.000707586	0.000160259	0.000001602
3	$g = 1 + \|z\| + \|f\|^{1/2}$	0.000512010	0.000112509	0.000000410
4	$g = (1 + \|z\| + \|f\|)^{1/2}$	0.000611528	0.000146118	0.000001741
5	$g = (1 + z^2 + \|f\|)^{1/2}$	0.000900004	0.000204128	0.000001775
6	$g = (1 + z^4 + f^2)^{1/4}$	0.000886025	0.000193071	0.000002601
7	$g = 1 + R_1$	0.000550849	0.000119910	0.000000414
8	$g = (1 + R_2)^{1/2}$	0.000707586	0.000160259	0.000001602
9	$g = 1$	процесс расходится	процесс расходится	0.193331173
Максимальная абсолютная погрешность численных решений для $a = 0$, $b = 1$				
№	Регуляризующая функция	Шаг 0.1	Шаг 0.05	Шаг 0.01
1	$g = 1 + \|z\|$	0.047029578	0.013710597	0.000713696
2	$g = (1 + \|f\|)^{1/2}$	0.000824707	0.000249922	0.000001663
3	$g = 1 + \|z\| + \|f\|^{1/2}$	0.000265927	0.000025385	0.000000017
4	$g = (1 + \|z\| + \|f\|)^{1/2}$	0.000570299	0.000115649	0.000000554
5	$g = (1 + z^2 + \|f\|)^{1/2}$	0.000559160	0.000109360	0.000000180
6	$g = (1 + z^4 + f^2)^{1/4}$	0.000630398	0.000136417	0.000000390
7	$g = 1 + R_1$	0.000602708	0.000090517	0.000000145
8	$g = (1 + R_2)^{1/2}$	0.000592523	0.000122175	0.000000346
9	$g = 1$	процесс расходится	процесс расходится	0.528189578

$a = 0$, $b = 1$, находим кривизну в точке экстремума

$$k_* = \left.\frac{|y''_{xx}|}{(1 + |y'_x|^2)^{3/2}}\right|_{x=x_*} = |y''_{xx}|_{x=x_*} \simeq e\left(\frac{1}{\varepsilon} - 1\right). \qquad (19)$$

Таким образом, кривизна k_* стремится к бесконечности при $\varepsilon \to 0$. Поэтому в окрестности точки экстремума x_*, где происходят наиболее существенные качественные изменения решения, необходимо сделать небольшой шаг для получения высокой точности численных расчетов. При выборе регуляризующей функции № 1 в табл. 2 в окрестности экстремума имеем $g = 1 + |z| \approx 1$; следовательно величина шага по x (при фиксированном N) здесь будет максимальной (тогда как для этой области с большой кривизной требуется небольшой шаг). Это обстоятельство приводит к большой ошибке вычисления в области экстремума для функции $g = 1 + |z|$.

Чтобы пояснить вышесказанное более наглядно, сделаем дробно-линейное преобразование независимой переменной

$$X = \frac{(\beta + 1)x}{x + \beta}, \quad \beta = \frac{x_*}{1 - 2x_*}, \qquad (20)$$

которое растягивает область пограничного слоя и переводит точку x_* прямой x в точку $X_* = 1/2$ прямой X (и оставляет конечные точки рассматриваемого интервала неподвижными). На рис. 2a) сплошной линией изображено точное решение (2) задачи (1) в плоскости X, y для $a = 0$, $b = 1$,

Таблица 2. Сравнение точности численных решений преобразованной задачи (11), которая используется для решения исходной задачи (1), для различных регуляризующих функций g при $\varepsilon = 0.005$ для разного числа точек сетки N. Здесь $R_1 = \max(|z|, |f|^{1/2})$ и $R_2 = \max(z^2, |f|)$

Максимальная абсолютная погрешность численных решений для $a = 1$, $b = 0$				
№	Регуляризующая функция	$N = 100$	$N = 200$	$N = 500$
1	$g = 1 + \lvert z\rvert$	0.002126935	0.000129392	0.000001946
2	$g = (1 + \lvert f\rvert)^{1/2}$	0.000183256	0.000007810	0.000000141
3	$g = 1 + \lvert z\rvert + \lvert f\rvert^{1/2}$	0.000337988	0.000010201	0.000000132
4	$g = (1 + \lvert z\rvert + \lvert f\rvert)^{1/2}$	0.000227354	0.000007881	0.000000140
5	$g = (1 + z^2 + \lvert f\rvert)^{1/2}$	0.000216955	0.000012022	0.000000216
6	$g = (1 + z^4 + f^2)^{1/4}$	0.000242947	0.000013334	0.000000289
7	$g = 1 + R_1$	0.000152543	0.000002787	0.000000035
8	$g = (1 + R_2)^{1/2}$	0.000188884	0.000007943	0.000000139
9	$g = 1$	0.193331172	0.006948616	0.000105565
Максимальная абсолютная погрешность численных решений для $a = 0$, $b = 1$				
№	Регуляризующая функция	$N = 100$	$N = 200$	$N = 500$
1	$g = 1 + \lvert z\rvert$	0.022065809	0.001390730	0.000470727
2	$g = (1 + \lvert f\rvert)^{1/2}$	0.000685290	0.000129855	0.000006104
3	$g = 1 + \lvert z\rvert + \lvert f\rvert^{1/2}$	0.001389189	0.000027408	0.000000479
4	$g = (1 + \lvert z\rvert + \lvert f\rvert)^{1/2}$	0.000481694	0.000019363	0.000000765
5	$g = (1 + z^2 + \lvert f\rvert)^{1/2}$	0.000762107	0.000039963	0.000000667
6	$g = (1 + z^4 + f^2)^{1/4}$	0.000751407	0.000081003	0.000000685
7	$g = 1 + R_1$	0.000617123	0.000016893	0.000000338
8	$g = (1 + R_2)^{1/2}$	0.000729929	0.000060206	0.000000643
9	$g = 1$	0.528189578	0.018983935	0.000288408

$\varepsilon = 0.005$. Абсолютная погрешность E численного решения преобразованной задачи (11) с регуляризующей функцией $g = 1 + |z|$, шагом $h = 0.01$ и теми же самыми значениями параметров показана на рис. 2*b*). Видно, что максимальная абсолютная погрешность в этом случае находится в области перехода между пограничным слоем и внешней областью (вблизи экстремума функции y). К сожалению, в общем случае точка x_* заранее неизвестна; поэтому для численного интегрирования не удается использовать преобразование (20).

Регуляризующие функции смешанного типа №№ 3–8 в табл. 1 и 2 в дополнение к $z = y'_x$ содержат также $f = y''_{xx}$ и удовлетворяют асимптотическому условию (14) в области пограничного слоя. Включение второй производной в эти формулы позволяет учесть большую кривизну в окрестности точки экстремума (см. (19)) и, соответственно, уменьшает размер шага по x (при постоянном шаге по ξ) в этой области. Поэтому точность численных решений, полученных с помощью регуляризующих функций №№ 3–8, значительно выше, чем при использовании функции № 1. Для немонотонного решения (при $a = 0$, $b = 1$) наилучшие результаты дает регуляризующая функция № 7.

На рис. 3 изображены результаты численного интегрирования преобразованной задачи (11), используемой для решения исходной задачи (1), для $a = 0$, $b = 1$, $\varepsilon = 0.005$, $h = 0.01$ и $g = (1 + z^2 + |f|)^{1/2}$. Для наглядности решения приводятся как с использованием исходной незави-

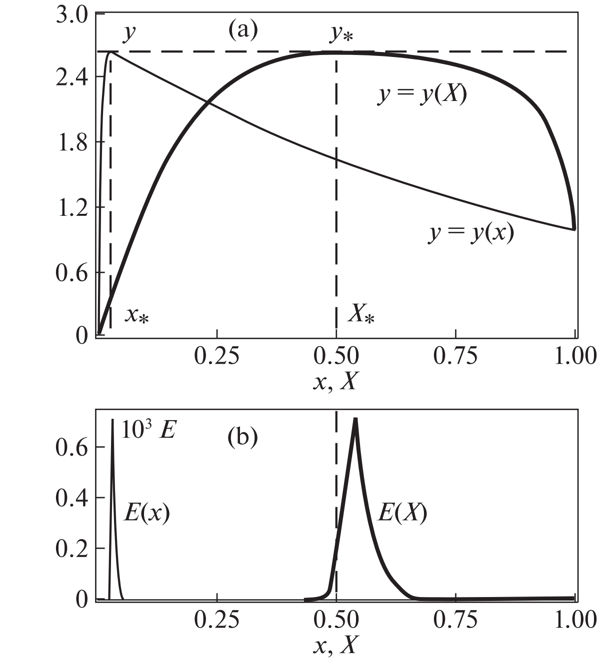

Рис. 2. *а*) Точное решение (2) задачи (1) при $a = 0$, $b = 1$, $\varepsilon = 0.005$ в плоскости x, y (тонкая сплошная линия) и в плоскости X, y (сплошная линия); *b*) абсолютная погрешность E численного решения преобразованной задачи (11) с регуляризующей функцией $g = 1 + |z|$ для тех же численных значений параметров в плоскости x, y (тонкая сплошная линия) и в плоскости X, y (сплошная линия).

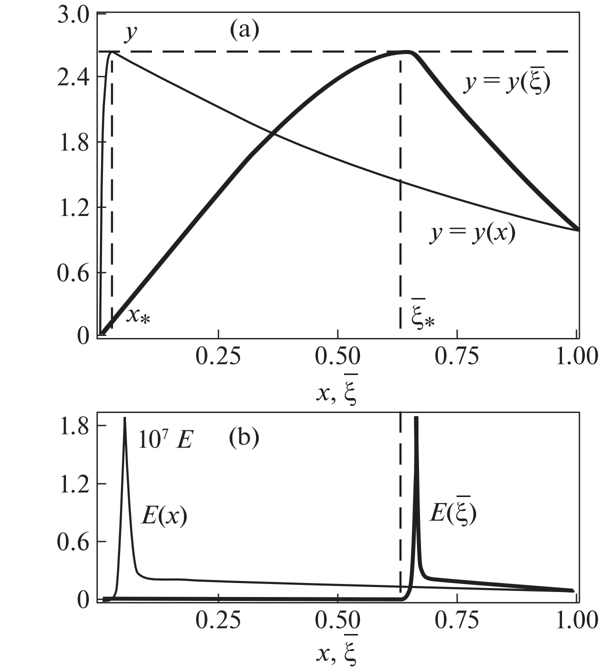

Рис. 3. *а*) Численные решения преобразованной задачи (11), которая используется для решения исходной задачи (1), при $a = 0$, $b = 1$, $\varepsilon = 0.005$ для $g = (1 + z^2 + |f|)^{1/2}$ и $h = 0.01$: $y(x)$ (тонкая сплошная линия) и $y(\overline{\xi})$, где $\overline{\xi} = \xi / \xi_1$ (сплошная линия); *b*) абсолютные погрешности $E(x)$ и $E(\overline{\xi})$ численных решений преобразованной задачи (11) для тех же значений параметров и регуляризующей функции g.

симой переменной x, так и нормированной нелокальной переменной $\overline{\xi} = \xi/\xi_1$, которая растягивает область пограничного слоя. Именно такое растяжение области с большими градиентами, которое происходит автоматически после выбора подходящей регуляризующей функции, уменьшает размер шага по x и обеспечивает высокую точность численных решений в пограничном слое.

Далее будут рассматриваться только сингулярно возмущенные задачи с пограничным слоем, которые имеют немонотонные решения (поскольку такие задачи представляют наибольшие трудности для численного интегрирования).

4.2. Дополнительные комментарии: качественные свойства некоторых регуляризующих функций

Рассмотрим опять краевую задачу для линейного уравнения второго порядка (1) при $a = 0$, $b = 1$, $\varepsilon = 0.005$. Точное решение этой задачи немонотонно и определяется соотношениями (2), а асимптотическое решение задается формулой $y_a = e^{1-x} - e^{1-200x}$. Путем перехода к нелокальной переменной (9) задача для одного уравнения (1) преобразуется в задачу для системы уравнений (11), где $f = -\varepsilon^{-1}(z + y)$ и $z = y'_x$.

Проведем качественный анализ второго уравнения системы (11) для некоторых регуляризующих функций g. Для этого исследуем поведение функции $\Phi = z/g$ (это правая часть второго уравнения) в плоскости ξ, Φ для различных функций g на решении рассматриваемой задачи.

Для $g = 1$, что соответствует прямому численному решению при $\xi = x$, функция $\Phi = z/g$ изменяется в широком диапазоне $-2.589 < \Phi < 540.917$, немонотонна и резко возрастает вблизи точки $\xi = 0$, см. рис. 4*a*. Чтобы получить адекватные численные решения на основе равномерной сетки для $g = 1$, необходимо взять большое количество точек N. На рис. 4*a* показана аналогичная кривая для регуляризующей функции $g = 1 + |z|$. Эта кривая изменяется в полосе $-1 \le \Phi \le 1$ и имеет вид негладкой ступеньки, в окрестности которой наблюдаются большие градиенты; для равномерной сетки по ξ в этом случае также необходимо взять достаточно большое количество точек N (но существенно меньше, чем для $g = 1$ для уме-

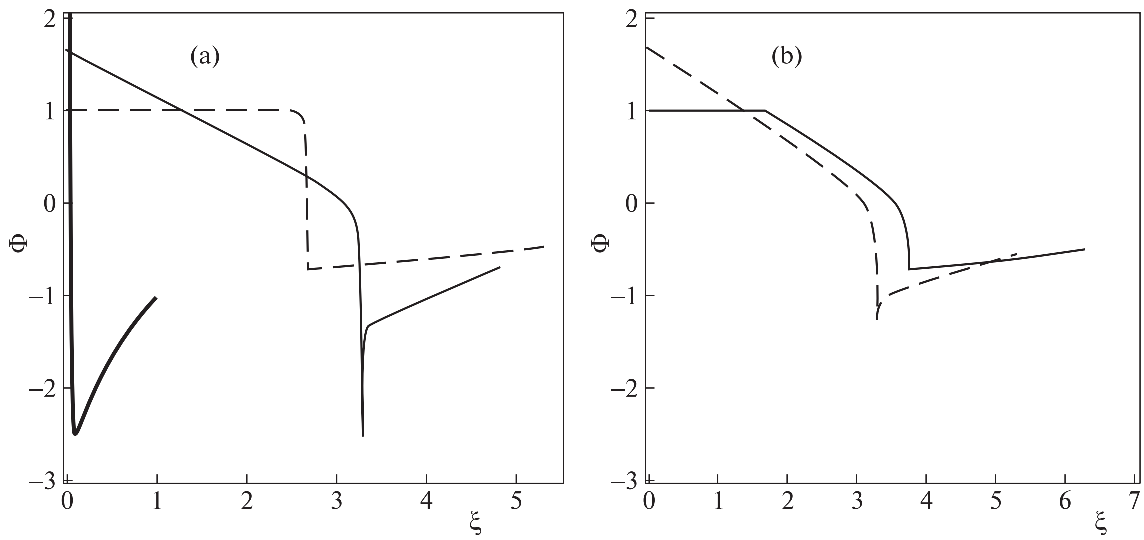

Рис. 4. Зависимость Φ от ξ в задаче (1) при $a = 0$, $b = 1$, $\varepsilon = 0.005$ для регуляризующих функций: *a*) $g = 1$ (сплошная линия), $g = 1 + |z|$ (штриховая линия) и $g = (1 + |f|)^{1/2}$ (тонкая сплошная линия) и *b*) $g = 1 + \max(|z|, |f|^{1/2})$ (сплошная линия) и $g = (1 + z^2 + |f|)^{1/2}$ (штриховая линия).

ренных N). Функция $g = (1 + |f|)^{1/2}$ также приводит к негладкой ступеньке с иглообразным включением (см. тонкую сплошную линию на рис. 4*a*), которое характеризуется большими градиентами. Поэтому для получения высокой точности вычислений здесь требуется брать достаточно много точек N.

Кривая $\Phi = \Phi(\xi)$ для $g = 1 + \max(|z|, |f|^{1/2})$ (см. рис. 4*b*) изменяется в узкой полосе $-1 < \Phi < 1$ и является гораздо более плоской, чем кривые на рис. 4*a*; тестовые расчеты показывают, что здесь можно использовать равномерную сетку по ξ с достаточно малым числом точек сетки N. На рис. 4*b* изображена также кривая $\Phi = \Phi(\xi)$ для регуляризующей функции $g = (1 + z^2 + |f|)^{1/2}$. Эта кривая имеет вид сглаженной ступеньки и не слишком большие значения производных. Поэтому в этом случае при численном интегрировании преобразованной системы (11) можно использовать равномерную сетку по ξ с умеренным или относительно небольшим числом точек сетки N.

4.3. Многопараметрическая линейная краевая задача, имеющая решения с несколькими экстремумами

Тестовая задача 2. Рассмотрим теперь более сложную пятипараметрическую линейную краевую задачу

$$\varepsilon y''_{xx} + y'_x + c\cos(\lambda x) = 0 \quad (0 < x < 1); \qquad y(0) = a, \quad y(1) = b, \tag{21}$$

где a, b, c, λ, ε — свободные параметры. В зависимости от значений параметров, эта задача может иметь один, два и более экстремумов или не может иметь их вообще.

Легко показать, что точное решение задачи (21) определяется формулами

$$\begin{gathered} y = A + Be^{-x/\varepsilon} + S(x), \\ S(x) = \frac{c[\varepsilon\lambda\cos(\lambda x) - \sin(\lambda x)]}{\lambda(1 + \varepsilon^2\lambda^2)}, \\ A = \frac{b - S(1) + [S(0) - a]e^{-1/\varepsilon}}{1 - e^{-1/\varepsilon}}, \\ B = \frac{a - b + S(1) - S(0)}{1 - e^{-1/\varepsilon}}. \end{gathered} \tag{22}$$

При $\varepsilon \to 0$ соответствующее асимптотическое решение имеет вид

$$\begin{gathered} y = b + c\frac{\sin\lambda}{\lambda} + \\ + \left(a - b - c\frac{\sin\lambda}{\lambda}\right)e^{-x/\varepsilon} - \frac{c}{\lambda}\sin(\lambda x). \end{gathered} \tag{23}$$

Рассмотрим более подробно частный случай $a = 0$, $b = c = 1$ и $\lambda = \pi n$ ($n = 1, 2, \ldots$). Подставляя указанные значения параметров в (23), получим

$$y = 1 - e^{-x/\varepsilon} - \frac{1}{\lambda}\sin(\lambda x), \quad \lambda = \pi n. \tag{24}$$

На рис. 5 сплошными линиями изображены точные решения задачи (21), которые описываются формулами (22) при $a = 0$, $b = c = 1$ и $\varepsilon = 0.005$, для двух значений λ: $\lambda = \pi$ и $\lambda = 2\pi$. В

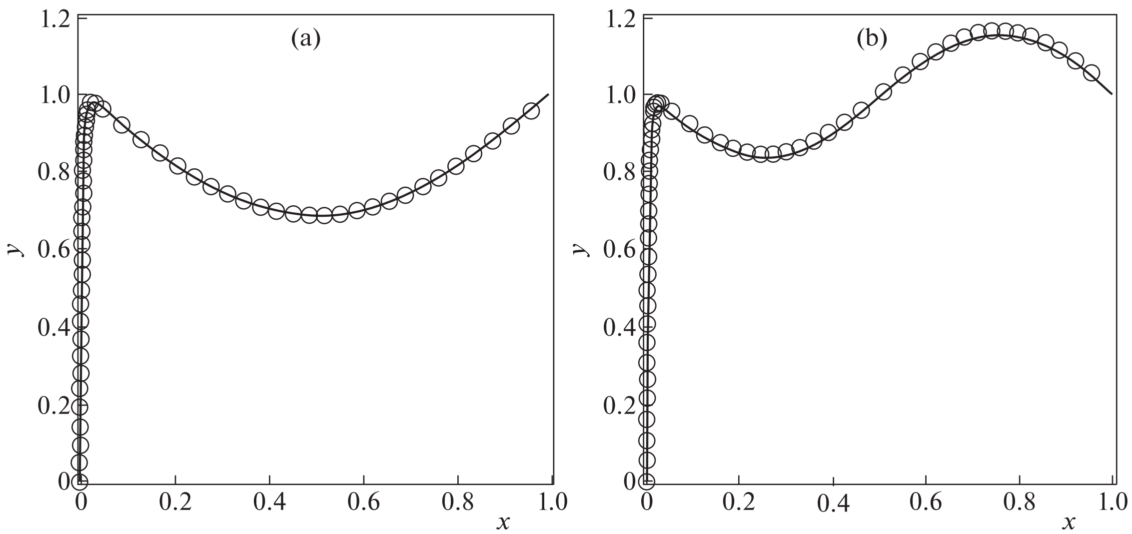

Рис. 5. Точные решения (22) задачи (21) при $a = 0$, $b = c = 1$, $\varepsilon = 0.005$ (сплошные линии) и численные решения соответствующей преобразованной задачи (11) с регуляризующей функцией $g = (1 + z^2 + |f|)^{1/2}$ и шагом $h = 0.01$ (точки) для двух значений λ: *a*) $\lambda = \pi$ и *b*) $\lambda = 2\pi$.

этих случаях решение имеет два и три экстремума соответственно (для $\lambda = \pi$ при $x_* = 0.0265534145$ решение достигает максимального значения $y_* = 0.978476138$). Результаты численного решения преобразованной задачи (11), используемой для решения задачи (21), с регуляризующей функцией $g = (1 + z^2 + |f|)^{1/2}$ и фиксированным шагом $h = 0.01$ при тех же значениях определяющих параметров, показаны точками. Видно, что имеет место хорошее совпадение между численными и точными решениями. Максимальная абсолютная погрешность численных решений для $\lambda = \pi$ и $\lambda = 2\pi$ равны соответственно $E = 0.000000926$ и $E = 0.009993346$. Максимальные абсолютные погрешности асимптотических решений (24) для $\lambda = \pi$ и $\lambda = 2\pi$ равны $E = 0.009966909$ и $E = 0.009992805$.

5. СИНГУЛЯРНО ВОЗМУЩЕННЫЕ НЕЛИНЕЙНЫЕ КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ. СРАВНЕНИЕ ЧИСЛЕННЫХ И АНАЛИТИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ

5.1. Многопараметрическая краевая задача с квадратичной нелинейностью. Точные и численные решения

Тестовая задача 3. Рассмотрим пятипараметрическую краевую задачу с квадратичной нелинейностью

$$\varepsilon y''_{xx} + (y + px + q)y'_x + p(y + px + q) = 0 \quad (0 < x < 1); \tag{25}$$

$$y(0) = a, \quad y(1) = b, \tag{26}$$

где a, b, p, q, ε — свободные параметры.

Замена $u = y + px + q$ преобразует уравнение (25) в автономное уравнение $\varepsilon u''_{xx} + uu'_x = 0$; введя новую переменную $v(u) = u'_x$ последнее сводится к линейному ОДУ первого порядка $\varepsilon v'_u + u = 0$. В результате можно получить общее решение уравнения (25) в явном виде

$$y = c\frac{1 - Ae^{-cx/\varepsilon}}{1 + Ae^{-cx/\varepsilon}} - px - q. \tag{27}$$

Постоянные интегрирования A и c определяются из трансцендентной системы уравнений

$$c\frac{1 - A}{1 + A} = a + q, \quad c\frac{1 - Ae^{-c/\varepsilon}}{1 + Ae^{-c/\varepsilon}} = b + p + q, \tag{28}$$

которая возникает после подстановки выражения (27) в граничные условия (26).

При $\varepsilon \to 0$ и $b + p + q > 0$ асимптотическое решение системы (28) приводит к формулам

$$A = \frac{b - a + p}{b + a + p + 2q}, \quad c = b + p + q. \tag{29}$$

Отметим, что асимптотическое решение (29) точно удовлетворяет первому уравнению системы (28), а невязка второго уравнения этой системы имеет порядок $e^{-(b+p+q)/\varepsilon}$ при $\varepsilon \to 0$.

На рис. 6*a* сплошной линией изображено точное решение задачи (25)–(26) при $a = b = 1$, $p = 1$, $q = 0$, $\varepsilon = 0.005$, которое определяется формулой (27) для $A = 1/3$, $c = 2$ (в этом случае разница

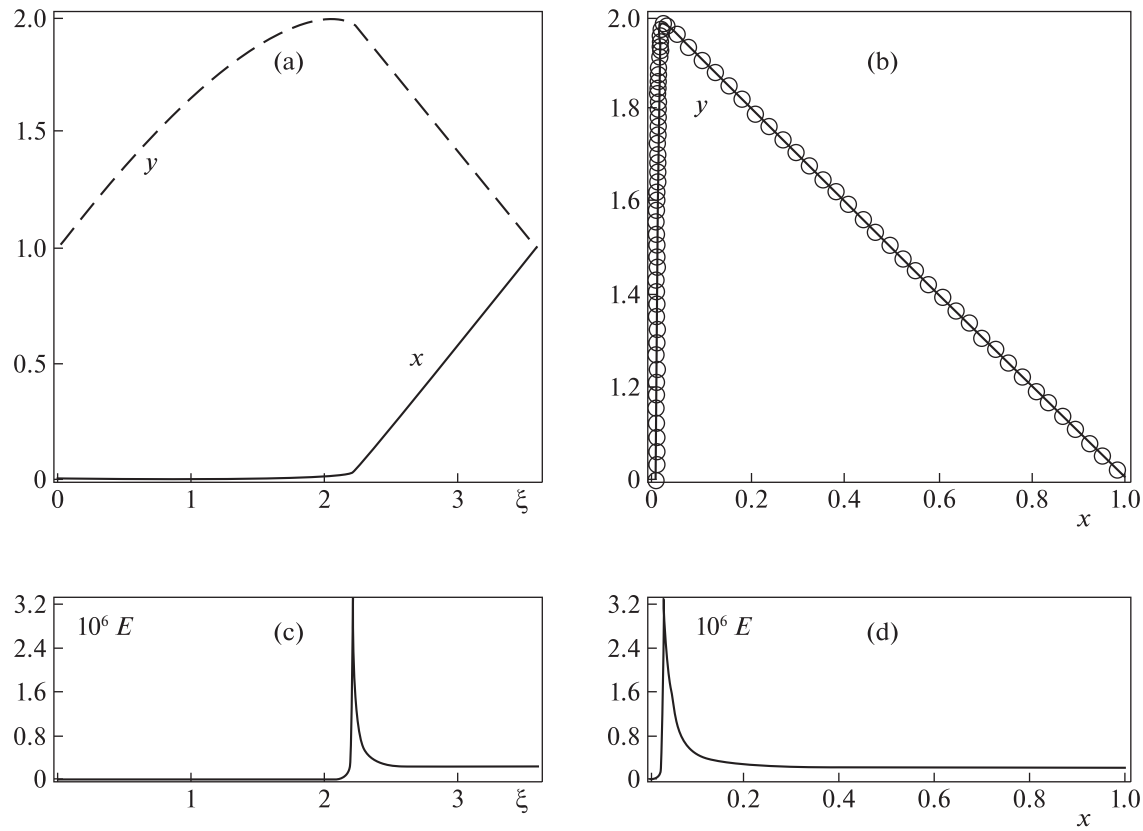

Рис. 6. *a*) Численное решение преобразованной задачи (11), которая используется для решения исходной задачи (25)–(26), для регуляризующей функции $g = (1 + z^2 + |f|)^{1/2}$ при $a = 1$, $b = 1$, $p = 1$, $q = 0$, $\varepsilon = 0.005$: $x = x(\xi)$ (сплошная линия) и $y = y(\xi)$ (штриховая линия); *b*) точное решение (27) исходной задачи (25)–(26) (сплошная линия) и численное решение преобразованной задачи (11) (кружки) для $g = (1 + z^2 + |f|)^{1/2}$ с теми же значениями параметров; *c*) и *d*) соответствующие абсолютные погрешности $E = E(\xi)$ и $E = E(x)$ численных решений преобразованной задачи (11).

между асимптотическим и точным решениями трансцендентной системы (28) лежит далеко за пределами точности наших расчетов). Кружочки представляют собой результаты численного решения соответствующей преобразованной задачи (11) с регуляризующей функцией $g = (1 + z^2 + |f|)^{1/2}$, которое получено методом пристрелки (из точки $x = 0$) с шагом $h = 0.01$ по ξ с помощью Maple. Максимум модуля разности между точным и численным решением равен 0.000003261.

В табл. 3 приведены максимальные абсолютные погрешности численных решений преобразованной задачи (11), используемой для решения исходной задачи (25)–(26), при $a = b = 1$, $p = 1$, $q = 0$, $\varepsilon = 0.005$ с различными регуляризующими функциями g и тремя разными шагами h. Видно, что функции №№ 2–8 позволяют получать численные решения во всей области с высокой точностью даже при достаточно большом размере шага (по ξ), равном $h = 0.1$.

В табл. 4 и 5 приведены максимальные абсолютные погрешности численных решений преобразованной задачи (11), используемой для решения исходной задачи (25)–(26) при $a = b = 0$, $p = 1$, $q = 0$ и $\varepsilon = 0.005$, для трех шагов h, разного количества точек сетки N и восьми разных регуляризующих функций g. Частный случай $g = 1$ соответствует прямому численному решению (без использования преобразований) с тем же шагом по x. Видно, что функции №№ 3, 5–8 позволяют получать численные решения с высокой точностью. Неудовлетворительные результаты для функции № 2 можно объяснить тем, что в этом случае в начальной точке происходит вырождение, где вторая производная обращается в нуль: $y''_{xx}|_{x=0} = f|_{x=0} = 0$. Действительно, при выборе регуляризующей функции № 2 в окрестности точки $x = 0$ имеем $g = (1 + |f|)^{1/2} \approx 1$ и асимптотическое условие (14) не выполняется. Поэтому функция $g = (1 + |f|)^{1/2}$ не может здесь подавить рост правой части второго уравнения преобразо-

Таблица 3. Сравнение точности численных решений преобразованной задачи (11), которая используется для решения исходной задачи (25)–(26), для различных регуляризующих функций g при $a = b = 1$, $p = 1$, $q = 0$, $\varepsilon = 0.005$ для трех шагов h

Максимальная абсолютная погрешность численных решений задачи (25)–(26)				
№	Регуляризующая функция	Шаг 0.1	Шаг 0.05	Шаг 0.01
1	$g = 1 + \lvert z\rvert$	0.137389203	0.053399823	0.000857913
2	$g = (1 + \lvert f\rvert)^{1/2}$	0.000937303	0.000228167	0.000005030
3	$g = 1 + \lvert z\rvert + \lvert f\rvert^{1/2}$	0.000637870	0.000096382	0.000000429
4	$g = (1 + \lvert z\rvert + \lvert f\rvert)^{1/2}$	0.000786873	0.000196698	0.000003249
5	$g = (1 + z^2 + \lvert f\rvert)^{1/2}$	0.000607467	0.000154641	0.000003261
6	$g = (1 + z^4 + f^2)^{1/4}$	0.000617535	0.000156509	0.000005624
7	$g = 1 + R_1$	0.000621275	0.000164464	0.000001680
8	$g = (1 + R_2)^{1/2}$	0.000630415	0.000172091	0.000004600
9	$g = 1$	процесс расходится	процесс расходится	процесс расходится

Таблица 4. Сравнение точности численных решений преобразованной задачи (11), которая используется для решения исходной задачи (25)–(26), для различных регуляризующих функций g при $a = b = 0$, $p = 1$, $q = 0$, $\varepsilon = 0.005$ для трех шагов h

Максимальная абсолютная погрешность численных решений задачи (25)–(26)				
№	Регуляризующая функция	Шаг 0.1	Шаг 0.05	Шаг 0.01
1	$g = 1 + \lvert z\rvert$	0.177592060	0.035246285	0.000212137
2	$g = (1 + \lvert f\rvert)^{1/2}$	процесс расходится	0.376921099	0.021473151
3	$g = 1 + \lvert z\rvert + \lvert f\rvert^{1/2}$	0.000393742	0.000067536	0.000000061
4	$g = (1 + \lvert z\rvert + \lvert f\rvert)^{1/2}$	0.025249660	0.006467125	0.000196032
5	$g = (1 + z^2 + \lvert f\rvert)^{1/2}$	0.000752856	0.000163579	0.000000699
6	$g = (1 + z^4 + f^2)^{1/4}$	0.000627973	0.000154532	0.000002003
7	$g = 1 + R_1$	0.000663385	0.000119895	0.000000265
8	$g = (1 + R_2)^{1/2}$	0.000712931	0.000202734	0.000000999
9	$g = 1$	процесс расходится	процесс расходится	0.019513818

ванной задачи (11). В результате длина переменного шага по x (для фиксированного N) здесь будет максимальной (тогда как для этой области с большой первой производной $y'_x|_{x=0} \approx 2\varepsilon^{-1}$, требуется маленький шаг). Указанное обстоятельство приводит к большой ошибке вычислений в области пограничного слоя для функции $g = (1 + |f|)^{1/2}$.

Из табл. 4 и 5 видно, что использование регуляризующей функции № 4 также дает низкую точность численных решений. Это связано с тем, что в этом случае $g = (1 + |z| + |f|)^{1/2}|_{x=0} = O(|z|^{1/2})$, т.е. вблизи начальной точки $x = 0$ асимптотическое условие (14) не выполняется. Наилучшие результаты в табл. 4 и 5 дают регуляризующие функции № 3 и № 7.

5.2. Многопараметрическая краевая задача с экспоненциальной нелинейностью. Точные и численные решения

Тестовая задача 4. Рассмотрим теперь пятипараметрическую краевую задачу с экспоненциальной нелинейностью

$$\varepsilon y''_{xx} + e^{y+px+q} y'_x + p e^{y+px+q} = 0 \quad (0 < x < 1); \quad (30)$$

Таблица 5. Сравнение точности численных решений преобразованной задачи (11), которая используется для решения исходной задачи (25)–(26), для различных регуляризующих функций g при $a = b = 0$, $p = 1$, $q = 0$, $\varepsilon = 0.005$ для разного числа точек сетки N

Максимальная абсолютная погрешность численных решений задачи (25)–(26)				
№	Регуляризующая функция	$N = 100$	$N = 200$	$N = 300$
1	$g = 1 + \|z\|$	0.000734178	0.000325332	0.000061158
2	$g = (1 + \|f\|)^{1/2}$	процесс расходится	0.034146715	0.016310528
3	$g = 1 + \|z\| + \|f\|^{1/2}$	0.000195161	0.000003566	0.000000433
4	$g = (1 + \|z\| + \|f\|)^{1/2}$	0.004963520	0.000514743	0.000202650
5	$g = (1 + z^2 + \|f\|)^{1/2}$	0.000198725	0.000007921	0.000001328
6	$g = (1 + z^4 + f^2)^{1/4}$	0.000222372	0.000010748	0.000002162
7	$g = 1 + R_1$	0.000118378	0.000004655	0.000000747
8	$g = (1 + R_2)^{1/2}$	0.000159026	0.000009546	0.000001646
9	$g = 1$	0.019513818	0.001179663	0.000182152

$$y(0) = a, \quad y(1) = b, \tag{31}$$

где a, b, p, q, ε — свободные параметры.

Замена $u = y + px + q$ преобразует ОДУ (30) в автономное уравнение $\varepsilon u''_{xx} + e^u u'_x = 0$; введя новую переменную $v(u) = u'_x$ последнее сводится к линейному ОДУ первого порядка $\varepsilon v'_u + e^u = 0$. В результате получим общее решение уравнения (30) в явном виде

$$y = -\ln\left(ce^{-kx/\varepsilon} + \frac{1}{k}\right) - px - q. \tag{32}$$

Постоянные интегрирования c и k определяются из трансцендентной системы уравнений

$$c + \frac{1}{k} = e^{-a-q}, \quad ce^{-k/\varepsilon} + \frac{1}{k} = e^{-b-p-q}, \tag{33}$$

которая возникает после подстановки выражения (32) в граничные условия (31) и элементарных преобразований.

При $\varepsilon \to 0$ асимптотическое решение системы (33) приводит к формулам

$$c = e^{-a-q} - e^{-b-p-q}, \quad k = e^{b+p+q}. \tag{34}$$

В табл. 6 и 7 приведены максимальные абсолютные погрешности численных решений преобразованной задачи (11), используемой для решения исходной задачи (30)–(31) при $a = b = 0$, $p = 1$, $q = -1$, $\varepsilon = 0.005$, для трех шагов h, различного числа точек сетки N и различных регуляризующих функций g. Видно, что функции №№ 2–8 позволяют получать численные решения с высокой точностью. Наиболее эффективными являются функции № 3 и № 7. Отметим, что, как и ранее, функция № 1 малоэффективна; причина этого заключается в немонотонности решения и объясняется в разд. 1 и 2.

6. РЕГУЛЯРИЗУЮЩИЕ ФУНКЦИИ, РЕКОМЕНДУЕМЫЕ ДЛЯ ВЫЧИСЛЕНИЙ

Для всех рассматриваемых в данной статье сингулярно возмущенных линейных и нелинейных краевых задач с малым параметром, которые описываются ОДУ вида $\varepsilon y''_{xx} = F(x, y, y''_x)$, наиболее точные численные решения получаются путем использования регуляризующей функции (№ 7 в таблицах):

$$g = 1 + \max(|y'_x|, |y''_{xx}|^{1/2}),$$

где y''_{xx} можно заменить на $f = \varepsilon^{-1}F(x, y, y'_x)$. Эта формула наиболее универсальна и хорошо работает во всех случаях. Вместо нее можно использовать также функцию $g = \max(1, |y'_x|, |y''_{xx}|^{1/2})$. Кроме этого, хорошие результаты дают более простые регуляризующие функции $g = 1 + |y'_x| + |y''_{xx}|^{1/2}$ и $g = (1 + |y'_x|^2 + |y''_{xx}|)^{1/2}$ (№№ 3 и 5 в таблицах).

Напомним, что ранее в разд. 4.1 и 5.1 путем анализа численных решений тестовых задач (1) и (25)–(26) (для некоторых значений параметров) было показано, что регуляризующие функции (16) (функции №№ 1 и 2 в таблицах) имеют ограниченную применимость и плохо работают для немонотонных решений или если исходное уравнение вырождается на границе пограничного слоя.

Таблица 6. Сравнение точности численных решений преобразованной задачи (11), которая используется для решения исходной задачи (30)–(31), для различных регуляризующих функций g при $a = b = 0$, $p = 1$, $q = -1$, $\varepsilon = 0.005$ для трех шагов h

Максимальная абсолютная погрешность численных решений задачи (30)–(31)				
№	Регуляризующая функция	Шаг 0.1	Шаг 0.05	Шаг 0.01
1	$g = 1 + \|z\|$	0.185049898	0.035618317	0.000212182
2	$g = (1 + \|f\|)^{1/2}$	0.000692372	0.000191043	0.000001852
3	$g = 1 + \|z\| + \|f\|^{1/2}$	0.000479280	0.000062701	0.000000075
4	$g = (1 + \|z\| + \|f\|)^{1/2}$	0.000699196	0.000182170	0.000000707
5	$g = (1 + z^2 + \|f\|)^{1/2}$	0.000706940	0.000139584	0.000000656
6	$g = (1 + z^4 + f^2)^{1/4}$	0.000741403	0.000160845	0.000002135
7	$g = 1 + R_1$	0.000492648	0.000109479	0.000000283
8	$g = (1 + R_2)^{1/2}$	0.000790921	0.000199628	0.000001181
9	$g = 1$	процесс расходится	процесс расходится	0.016651291

Таблица 7. Сравнение точности численных решений преобразованной задачи (11), которая используется для решения исходной задачи (30)–(31), для различных регуляризующих функций g при $a = b = 0$, $p = 1$, $q = -1$, $\varepsilon = 0.005$ для разного числа точек сетки N

Максимальная абсолютная погрешность численных решений задачи (30)–(31)				
№	Регуляризующая функция	$N = 100$	$N = 200$	$N = 300$
1	$g = 1 + \|z\|$	0.008033009	0.000490903	0.000168976
2	$g = (1 + \|f\|)^{1/2}$	0.000174781	0.000006417	0.000001164
3	$g = 1 + \|z\| + \|f\|^{1/2}$	0.000254116	0.000003781	0.000000540
4	$g = (1 + \|z\| + \|f\|)^{1/2}$	0.000146092	0.000005956	0.000000895
5	$g = (1 + z^2 + \|f\|)^{1/2}$	0.000215039	0.000007804	0.000001386
6	$g = (1 + z^4 + f^2)^{1/4}$	0.000186220	0.000009774	0.000002374
7	$g = 1 + R_1$	0.000096813	0.000004651	0.000000799
8	$g = (1 + R_2)^{1/2}$	0.000149504	0.000009551	0.000001620
9	$g = 1$	0.016651291	0.000385984	0.000062467

7. КРАТКИЕ ВЫВОДЫ

Рассмотрены сингулярно возмущенные краевые задачи для обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с малым параметром при старшей производной. Такие задачи характеризуются узкими пограничными слоями с большими градиентами, что значительно ограничивает применимость к ним стандартных численных методов с постоянным шагом (что может привести к значительным погрешностям вычислений). Описан эффективный метод численного интегрирования сингулярно возмущенных краевых задач, основанный на использовании нелокальных преобразований. После применения таких преобразований получаются более удобные редуцированные задачи, которые позволяют применять стандартные численные методы с постоянным шагом по новой независимой переменной. Обширная апробация метода проводится на различных многопараметрических линейных и нелинейных задачах с монотонными и немонотонными решениями. Сравнение численных и точных решений тестовых сингулярно возмущенных краевых задач с малым параметром показало высокую точность метода, основанного на нелокальных преобразованиях.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Работа выполнена по теме государственного задания (№ госрегистрации АААА-А17-117021310385-6) и при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 18-29-10025).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ван-Дайк М.* Методы возмущений в механике жидкости. М.: Мир, 1967.
2. *Kevorkian J., Cole J.D.* Perturbation Methods in Applied Mathematics. New York: Springer, 1981.
3. *Lagerstrom P.A.* Matched Asymptotic Expansions. Ideas and Techniques. New York: Springer, 1988.
4. *Il'in A.M.* Matching of Asymptotic Expansions of Solutions of Boundary Value Problems. Providence: American Mathematical Society, 1992.
5. *Nayfeh A.H.* Perturbation Methods. New York: Wiley–Interscience, 2000.
6. *Polyanin A.D., Kutepov A.M., Vyazmin A.V., Kazenin D.A.* Hydrodynamics, Mass and Heat Transfer in Chemical Engineering. London: Taylor & Francis, 2002.
7. *Polyanin A.D., Zaitsev V.F.* Handbook of Exact Solutions for Ordinary Differential Equations, 2nd ed. Boca Raton–London: Chapman & Hall/CRC Press, 2003.
8. *Verhulst F.* Methods and Applications of Singular Perturbations, Boundary Layers and Multiple Timescale Dynamics. New York: Springer, 2005.
9. *Бахвалов Н.С.* К оптимизации методов решения краевых задач при наличии пограничного слоя // Журнал вычисл. матем. и матем. физики. 1969. Т. 9. № 4. С. 841–859.
10. *Ильин А.М.* Разностная схема для дифференциального уравнения с малым параметром при старшей производной // Мат. заметки. 1969. Т. 6. № 2. С. 237–248.
11. *Vulanovic R.* A uniform numerical method for quasilinear singular perturbation problems without turning points // Computing. 1989. V. 41. № 1. P. 97–106.
12. *Jain M.K., Iyengar S.R.K., Subramanyam G.S.* Variable mesh methods for the numerical solution of two-point singular perturbation problems // Comp. Methods in Appl. Mech. Eng. 1984. V. 42. № 3. P. 273–286.
13. *Шишкин Г.И.* Сеточные аппроксимации сингулярно возмущенных эллиптических и параболических уравнений. Екатеринбург: УрО РАН, 1992.
14. *Beckett G., Mackenzie J.A.* Convergence analysis of finite difference approximations on equidistributed grids to a singularly perturbed boundary value problem // Appl. Numer. Math. 2000. V. 35. № 2. P. 87–109.
15. *Farrell P., Hegarty A., Miller J.M., O'Riordan E., Shishkin G.I.* Robust Computational Techniques for Boundary Layers. Boca Raton–London: Chapman & Hall/CRC Press, 2000.
16. *Qiu Y., Sloan D.M., Tang T.* Numerical solution of a singularly perturbed two-point boundary value problem using equidistribution, analysis of convergence // J. Comput. Appl. Math. 2000. V. 116. № 1. P. 121–143.
17. *Frohner A., Roos H.-G.* The ε-uniform convergence of a defect correction method on a Shishkin mesh // Appl. Numerical Math. 2001. V. 37. P. 79–94.
18. *Miranker W.L.* Numerical Methods for Stiff Equations and Singular Perturbation Problems. Dordrecht: Reidel Publ, 2001.
19. *Aziz T., Khan A.* A spline method for second-order singularly perturbed boundary-value problems // J. Comput. Appl. Math. 2002. V. 147. № 2. P. 445–452.
20. *Vigo-Aguiar J., Natesan S.* An efficient numerical method for singular perturbation problems // J. Comput. Appl. Math. 2006. V. 192. № 1. P. 132–141.
21. *Rao S.C.S., Kumar M.* Exponential B-spline collocation method for self-adjoint singularly perturbed boundary value problems // Appl. Numerical Math. 2008. V. 58. P. 1572–1581.
22. *Shishkin G.I., Shishkina L.P.* Difference Methods for Singular Perturbation Problems. Boca Raton: Chapman & Hall/CRC Press, 2009.
23. *Kopteva N., O'Riordan E.* Shishkin meshes in the numerical solution of singularly perturbed differential equations // Int. J. Numer. Analysis and Modeling. 2010. V. 7. № 3. P. 393–415.
24. *Vulkov L.G., Zadorin A.I.* Two-grid algorithms for an ordinary second order equation with an exponential boundary layer in the solution // Int. J. Numer. Analysis and Modeling. 2010. V. 7. № 3. P. 580–592.
25. *Attili B.S.* Numerical treatment of singularly perturbed two point boundary value problems exhibiting boundary layers // Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat. 2011. V. 16. № 9. P. 3504–3511.
26. *Liu C.-S.* The Lie-group shooting method for solving nonlinear singularly perturbed boundary value problems // Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat. 2012. V. 17. № 4. P. 1506–1521.
27. *Das P.* Comparison of a priori and a posteriori meshes for singularly perturbed nonlinear parameterized problems // J. Comput. Appl. Math. 2015. V. 290. P. 16–25.
28. *Brdar M., Zarin H.* A singularly perturbed problem with two parameters on a Bakhvalov-type mesh // J. Comput. Appl. Math. 2016. V. 292. P. 307–319.
29. *Zarin H.* Exponentially graded mesh for a singularly perturbed problem with two small parameters // Appl. Numerical Math. 2017. V. 120. P. 233–242.
30. *Ahmadinia M., Safari Z.* Numerical solution of singularly perturbed boundary value problems by improved least squares method // J. Comput. Appl. Math. 2018. V. 331. P. 156–165.
31. *Polyanin A.D., Shingareva I.K.* Application of non-local transformations for numerical integration of singularly perturbed boundary-value problems with a small parameter // Int. J. Non-Linear Mechanics. 2018. V. 103. P. 37–54.
32. *Полянин А.Д., Шингарева И.К.* Сингулярные краевые задачи с пограничным слоем: Метод нелокальных преобразований, тестовые задачи, численное интегрирование // Весник НИЯУ МИФИ. 2018. Т. 7. № 1. С. 33–51.
33. *Polyanin A.D., Shingareva I.K.* The use of differential and non-local transformations for numerical integration of non-linear blow-up problems // Int. J. Non-Linear Mechanics. 2017. V. 94. P. 178–184.

34. *Polyanin A.D., Shingareva I.K.* Non-monotonic blow-up problems: Test problems with solutions in elementary functions, numerical integration based on non-local transformations // Appl. Math. Letters. 2018. V. 76. P. 123–129.
35. *Polyanin A.D., Shingareva I.K.* Non-linear problems with non-monotonic blow-up solutions: Non-local transformations, test problems, exact solutions, and numerical integration // Int. J. Non-Linear Mechanics. 2018. V. 99. P. 258–272.
36. *Polyanin A.D., Shingareva I.K.* Nonlinear problems with blow-up solutions: Numerical integration based on differential and nonlocal transformations, and differential constraints // Appl. Math. Comput. 2019. V. 336. P. 107–137.
37. *Polyanin A.D., Shingareva I.K.* The method of non-local transformations: Applications to blow-up problems // J. Physics: IOP Conf. Series. 2017. V. 937. 012042.
38. *Polyanin A.D., Shingareva I.K.* Non-linear blow-up problems for systems of ODEs and PDEs: Non-local transformations, numerical and exact solutions // Int. J. Non-Linear Mechanics. 2018. V. 111. P. 28–41.
39. *Kudryashov N.A., Sinelshchikov D.I.* On the criteria for integrability of the Liénard equation // Appl. Math. Letters. 2016. V. 57. P. 114–120.
40. *Muriel C., Romero J.L.* Nonlocal transformations and linearization of second-order ordinary differential equations // J. Physics A, Math. Theor. 2010. V. 43. 434025.
41. *Meleshko S.V., Moyo S., Muriel C., Romero J.L., Guha P., Choudhury A.G.* On first integrals of second-order ordinary differential equations // J. Eng. Math. 2013. V. 82. P. 17–30.
42. *Keller H.B.* Numerical Solution of Two Point Boundary Value Problems. Philadelphia: SIAM, 1974.
43. *Butcher J.C.* The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations, Runge–Kutta and General Linear Methods. New York: Wiley-Interscience, 1987.
44. *Fox L., Mayers D.F.* Numerical Solution of Ordinary Differential Equations for Scientists and Engineers. London: Chapman & Hall, 1987.
45. *Ascher U.M., Petzold L.R.* Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations. Philadelphia: SIAM, 1998.
46. *Shingareva I.K., Lizárraga-Celaya C.* Maple and Mathematica. A Problem Solving Approach for Mathematics, 2nd ed. Wien – New York: Springer, 2009.
47. *Griffiths D., Higham D.J.* Numerical Methods for Ordinary Differential Equations. Wien – New York: Springer, 2010.
48. *Hairer E., Norsett S.P., Wanner G.* Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems, 2nd ed. Berlin: Springer-Verlag, 1993.
49. *Hairer E., Wanner G.* Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems, 2nd ed. New York: Springer, 1996.
50. *Lambert J.D.* Numerical Methods for Ordinary Differential Systems. New York: Wiley, 1991.

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI", 2019, vol. 8, no. 6, pp. 515–532

The Qualitative Features of the Numerical Integration Problems with a Boundary Layer by Nonlocal Transformations

A. D. Polyanin[a,b,c,#] **and I. K. Shingareva**[d,##]

[a] *Institute for Problems in Mechanics, Russian Academy of Sciences, Moscow, 119526 Russia*
[b] *Bauman State Technical University, Moscow, 105005 Russia*
[c] *National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia*
[d] *University of Sonora, Hermosillo, Sonora, 83000 México*
[#]*e-mail: polyanin@ipmnet.ru*
[##]*e-mail: inna@mat.uson.mx*

Received August 27, 2019; revised August 27, 2019; accepted October 1, 2019

Abstract—The qualitative features of the numerical integration of two-point boundary-value problems of boundary-layer type by using nonlocal transformations are described. Such transformations, sometimes also called Sundman-type transformations, are defined by using an auxiliary differential equation and allow one to "stretch" the boundary-layer region (after which any adequate numerical methods with a fixed stepsize can be applied). Multiparameter nonlinear singularly perturbed boundary-value problems with a small parameter having exact solutions in elementary functions are presented, which can be used to test various numerical methods on non-uniform grids. Particular attention is paid to the study of the most difficult boundary-value problems for numerical analysis, which have non-monotonic solutions or degenerate solutions at the boundary of the boundary-layer. A comparison of numerical and exact solutions shows the high efficiency of the nonlocal transformation method for numerical integration of boundary-value problems with a boundary layer.

Keywords: ordinary differential equations with a small parameter, singularly perturbed boundary-value problems, boundary layer, nonlocal transformations, exact and numerical solutions

DOI: 10.1134/S2304487X19060099

REFERENCES

1. Van Dyke M., *Perturbation Methods in Fluid Mechanics*, New York, Academic Press, 1964.
2. Kevorkian J., Cole J. D., *Perturbation Methods in Applied Mathematics*, New York, Springer, 1981.
3. Lagerstrom P.A., *Matched Asymptotic Expansions. Ideas and Techniques*, New York, Springer, 1988.
4. Il'in A.M., *Matching of Asymptotic Expansions of Solutions of Boundary Value Problems*, Providence, American Mathematical Society, 1992.
5. Nayfeh A.H., *Perturbation Methods*, New York, Wiley–Interscience, 2000.
6. Polyanin A.D., Kutepov A.M., Vyazmin A.V., Kazenin D.A., *Hydrodynamics, Mass and Heat Transfer in Chemical Engineering*, London, Taylor & Francis, 2002.
7. Polyanin A.D., Zaitsev V.F., *Handbook of Exact Solutions for Ordinary Differential Equations, 2nd ed.,* Boca Raton – London, Chapman & Hall/CRC Press, 2003.
8. Verhulst F., *Methods and Applications of Singular Perturbations, Boundary Layers and Multiple Timescale Dynamics*, New York, Springer, 2005.
9. Bakhvalov N.S., On the optimization methods for solving boundary value problems with boundary layers, *Zh. Vychisl. Math. Fiz.*, 1969, vol. 24, pp. 841–859 (in Russian).
10. Il'in A.M., A difference scheme for a differential equation with a small parameter affecting the highest derivative, *Mat. Zametki*, 1969, vol. 6, pp. 237–248 (in Russian).
11. Vulanovic R., A uniform numerical method for quasilinear singular perturbation problems without turning points, *Computing*, 1989, vol. 41, no. 1, pp. 97–106.
12. Jain M.K., Iyengar S.R.K., Subramanyam G.S., Variable mesh methods for the numerical solution of two-point singular perturbation problems, *Comp. Methods in Appl. Mech. Eng.*, 1984, vol. 42, no. 3, pp. 273–286.
13. Shishkin G.I., *Setochnyye approksimatsii singulyarno vozmushchennykh ellipticheskikh i parabolicheskikh uravneniy* [Grid Approximations of Singularly Perturbed Elliptic and Parabolic Equations], Ekaterinburg, Ural Branch of Russian Academy of Sciences, 1992 (in Russian).
14. Beckett G., Mackenzie J.A., Convergence analysis of finite difference approximations on equidistributed grids to a singularly perturbed boundary value problem, *Appl. Numer. Math.*, 2000, vol. 35, no. 2, pp. 87–109.
15. Farrell P., Hegarty A., Miller J.M., O'Riordan E., Shishkin G.I., *Robust Computational Techniques for Boundary Layers*, Boca Raton – London, Chapman & Hall/CRC Press, 2000.
16. Qiu Y., Sloan D.M., Tang T., Numerical solution of a singularly perturbed two-point boundary value problem using equidistribution, analysis of convergence, *J. Comput. Appl. Math.*, 2000, vol. 116, no. 1, pp. 121–143.
17. Frohner A., Roos H.-G., The ε-uniform convergence of a defect correction method on a Shishkin mesh, *Appl. Numerical Math.*, 2001, vol. 37, pp. 79–94.
18. Miranker W.L., *Numerical Methods for Stiff Equations and Singular Perturbation Problems*, Dordrecht, Reidel Publ, 2001.
19. Aziz T., Khan A., A spline method for second-order singularly perturbed boundary-value problems, *J. Comput. Appl. Math.*, 2002, vol. 147, no. 2, pp. 445–452.
20. Vigo-Aguiar J., Natesan S., An efficient numerical method for singular perturbation problems, *J. Comput. Appl. Math.*, 2006, vol. 192, no. 1, pp. 132–141.
21. Rao S.C.S., Kumar M., Exponential B-spline collocation method for self-adjoint singularly perturbed boundary value problems, *Appl. Numerical Math.*, 2008, vol. 58, pp. 1572–1581.
22. Shishkin G.I., Shishkina L.P., *Difference Methods for Singular Perturbation Problems*, Boca Raton, Chapman & Hall/CRC Press, 2009.
23. Kopteva N., O'Riordan E., Shishkin meshes in the numerical solution of singularly perturbed differential equations, *Int. J. Numer. Analysis and Modeling*, 2010, vol. 7, no. 3, pp. 393–415.
24. Vulkov L.G., Zadorin A.I., Two-grid algorithms for an ordinary second order equation with an exponential boundary layer in the solution, *Int. J. Numer. Analysis and Modeling*, 2010, vol. 7, no. 3, pp. 580–592.
25. Attili B.S., Numerical treatment of singularly perturbed two point boundary value problems exhibiting boundary layers, *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat.*, 2011, vol. 16, no. 9, pp. 3504–3511.
26. Liu C.-S., The Lie-group shooting method for solving nonlinear singularly perturbed boundary value problems, *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simulat.*, 2012, vol. 17, no. 4, pp. 1506–1521.
27. Das P., Comparison of a priori and a posteriori meshes for singularly perturbed nonlinear parameterized problems, *J. Comput. Appl. Math.*, 2015, vol. 290, pp. 16–25.
28. Brdar M., Zarin H., A singularly perturbed problem with two parameters on a Bakhvalov-type mesh, *J. Comput. Appl. Math.*, 2016, vol. 292, pp. 307–319.
29. Zarin H., Exponentially graded mesh for a singularly perturbed problem with two small parameters, *Appl. Numerical Math.*, 2017, vol. 120, pp. 233–242.
30. Ahmadinia M., Safari Z., Numerical solution of singularly perturbed boundary value problems by improved least squares method, *J. Comput. Appl. Math.*, 2018, vol. 331, pp. 156–165.
31. Polyanin A.D., Shingareva I.K., Application of non-local transformations for numerical integration of singularly perturbed boundary-value problems with a small parameter, *Int. J. Non-Linear Mechanics*, 2018, vol. 103, pp. 37–54.
32. Polyanin A.D., Shingareva I.K., Singularly perturbed boundary value problems with a boundary layer: Method of nonlocal transformations, test problems, and numerical integration, *Vestnik NIYaU MIFI*, 2018, vol. 7, no. 1, pp. 33–51 (in Russian).
33. Polyanin A.D., Shingareva I.K., The use of differential and non-local transformations for numerical integration of non-linear blow-up problems, *Int. J. Non-Linear Mechanics*, 2017, vol. 94, pp. 178–184.
34. Polyanin A.D., Shingareva I.K., Non-monotonic blow-up problems: Test problems with solutions in elementary functions, numerical integration based on non-local transformations, *Appl. Math. Letters*, 2018, vol. 76, pp. 123–129.

35. Polyanin A.D., Shingareva I.K., Non-linear problems with non-monotonic blow-up solutions: Non-local transformations, test problems, exact solutions, and numerical integration, *Int. J. Non-Linear Mechanics*, 2018, vol. 99, pp. 258–272.

36. Polyanin A.D., Shingareva I.K., Nonlinear problems with blow-up solutions: Numerical integration based on differential and nonlocal transformations, and differential constraints, *Appl. Math. Comput.*, 2019, vol. 336, pp. 107–137.

37. Polyanin A.D., Shingareva I.K., The method of nonlocal transformations: Applications to blow-up problems, *J. Physics: IOP Conf. Series*, 2017, vol. 937, 012042.

38. Polyanin A.D., Shingareva I.K., Non-linear blow-up problems for systems of ODEs and PDEs: Non-local transformations, numerical and exact solutions, *Int. J. Non-Linear Mechanics*, 2018, vpl. 111, pp. 28–41.

39. Kudryashov N.A., Sinelshchikov D.I., On the criteria for integrability of the Liénard equation, *Appl. Math. Letters*, 2016, vol. 57, pp. 114–120.

40. Muriel C., Romero J.L., Nonlocal transformations and linearization of second-order ordinary differential equations, *J. Physics A, Math. Theor.*, 2010, vol. 43, 434025.

41. Meleshko S.V., Moyo S., Muriel C., Romero J.L., Guha P., Choudhury A.G., On first integrals of second-order ordinary differential equations, *J. Eng. Math.*, 2013, vol. 82, pp. 17–30.

42. Keller H.B., *Numerical Solution of Two Point Boundary Value Problems*, Philadelphia, SIAM, 1974.

43. Butcher J.C., *The Numerical Analysis of Ordinary Differential Equations, Runge–Kutta and General Linear Methods*, New York, Wiley-Interscience, 1987.

44. Fox L., Mayers D.F., *Numerical Solution of Ordinary Differential Equations for Scientists and Engineers*, London, Chapman & Hall, 1987.

45. Ascher U.M., Petzold L.R., *Computer Methods for Ordinary Differential Equations and Differential-Algebraic Equations*, Philadelphia, SIAM, 1998.

46. Shingareva I.K., Lizárraga-Celaya C., *Maple and Mathematica. A Problem Solving Approach for Mathematics, 2nd ed.,* Wien – New York, Springer, 2009.

47. Griffiths D., Higham D.J., *Numerical Methods for Ordinary Differential Equations*, Wien – New York, Springer, 2010.

48. Hairer E., Norsett S.P., Wanner G., *Solving Ordinary Differential Equations I: Nonstiff Problems, 2nd ed.,* Springer-Verlag, Berlin, 1993.

49. Hairer E., Wanner G., *Solving Ordinary Differential Equations II. Stiff and Differential-Algebraic Problems, 2nd ed.,* Springer, New York, 1996.

50. Lambert J.D., *Numerical Methods for Ordinary Differential Systems*, Wiley, New York, 1991.

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА “МИФИ”, 2019, том 8, № 6, с. 533–539

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ

УДК 517.91

АВТОМАТИЗАЦИЯ ПОСТРОЕНИЯ ТОЧНЫХ РЕШЕНИЙ НЕЛИНЕЙНЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Н. А. Кудряшов[1,*], А. А. Кутуков[1,]**

[1] *Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409, Россия*

**e-mail: nakudr@gmail.com*

***e-mail: alexkutuk@gmail.com*

Поступила в редакцию 09.10.2019 г.
После доработки 09.10.2019 г.
Принята к публикации 15.10.2019 г.

В работе представлено описание программы AFES (automatic finding exact solutions), предназначенной для нахождения точных решений обыкновенных дифференциальных уравнений в полиномиальной форме. Для нахождения точных решений используется метод простейших уравнений, который заключается в поиске точных решений дифференциального уравнения с использованием общего решения дифференциального уравнения меньшего порядка. Для того чтобы выбрать, в каком виде ищется точное решение, необходимо определить порядок полюса решения исходного уравнения и порядок полюса решения простейшего уравнения. Для этого применяется программа автоматического построения многоугольников Ньютона ACNP (automatic construction of Newton polygons). В работе в качестве простейших уравнений рассматриваются уравнение Риккати и уравнение для эллиптической функции Вейерштрасса. В целях тестирования программы приводятся примеры построения точных решений различных нелинейных дифференциальных уравнений. Программа AFES написана в системе компьютерной алгебры Maple. Приводится алгоритм работы программы и примеры ее применения. Программа AFES имеет ряд преимуществ по сравнению с известными программами для нахождения точных решений дифференциальных уравнений. В частности, построенные точные решения являются различными, то есть не сводятся друг к другу путем элементарных преобразований.

Ключевые слова: метод простейших уравнений, точные решения, нелинейные дифференциальные уравнения, система компьютерной алгебры

DOI: 10.1134/S2304487X19060038

1. ВВЕДЕНИЕ

Математические модели многих физических процессов содержат неинтегрируемые нелинейные дифференциальные уравнения в частных производных, например, уравнения для описания распространения импульсов в оптическом волокне [1–3], уравнение Курамото–Сивашинского [4, 5], уравнение для описания волн в жидкости с конвекцией [6] и другие. В ряде случаев удается осуществить редукцию к обыкновенным дифференциальным уравнениям и найти их аналитические решения, содержащие меньшее количество произвольных констант, чем порядок дифференциального уравнения (эти решения называют точными). Среди методов для нахождения точных решений можно выделить метод гиперболического тангенса [7, 8], метод экспоненциальных функций [9], метод G'/G разложений [10], метод логистических функций [11], метод простейших уравнений [12, 13]. Большинство этих методов имеют схожие принципы [14]. Как показано в работах [15, 16], неаккуратное использование методов гиперболического тангенса и экспоненциальных функций приводит к нахождению на первый взгляд новых решений, однако детальное рассмотрение показывает, что они отличаются от уже известных только формой записи. В связи с этим для автоматизации построения точных решений выбран метод простейших уравнений. Он объединяет в себе некоторые другие методы построения точных решений и прост для реализации в системах компьютерной алгебры.

Рассматривается нелинейное обыкновенное дифференциальное уравнение порядка n в полиномиальной форме

$$M(y(z), y_z(z), y_{zz}(z), \dots, z) = 0. \qquad (1)$$

Пусть общее решение уравнения (1) имеет порядок полюса p. Выберем уравнение порядка $m < n$, решение которого известно

$$E(Y(z), Y_z(z), \dots, z) = 0. \qquad (2)$$

Зависимость $y(z) = F(Y(z))$ выбирается исходя из порядков полюсов простейшего (2) и исходного (1) уравнений.

В качестве примера простейшего уравнения может быть выбрано уравнение Риккати

$$Y_z = -Y^2 + b, \qquad (3)$$

или уравнения для эллиптических функций Якоби

$$Q_z^2 = Q^4 + aQ^3 + bQ^2 + cQ + d, \qquad (4)$$

или Вейерштрасса

$$R_z^2 = -4R^3 + aR^2 + 2bR + c. \qquad (5)$$

2. АЛГОРИТМ ПРОГРАММЫ ПОСТРОЕНИЯ ТОЧНЫХ РЕШЕНИЙ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ

Программа AFES [17] написана в системе компьютерной алгебры Maple. Входные данные представляют собой обыкновенное дифференциальное уравнение *ode* полиномиального вида (1). Вывод программы осуществляется в рабочем пространстве среды Maple и представляет собой точные решения уравнения *ode* с ограничениями на параметры, либо информационное сообщение с причиной, по которой не удалось найти точное решение уравнения.

Программа AFES позволяет искать точные решения дифференциальных уравнений полиномиального вида с целым порядком полюса. Для поиска решений использованы два простейших уравнения:

• уравнение Риккати $Y_z = -Y^2 + b$;

• уравнение для эллиптической функции Вейерштрасса

$$\wp_z^2 = 4\wp^3 - g_2\wp - g_3.$$

Алгоритм программы AFES для нахождения точных решений нелинейных *ode*:

1. Определение порядка полюса *ode* при помощи многоугольника Ньютона [18–20].

2. При выборе уравнения Риккати задание усеченного разложения в виде $y(z) = \sum_{k=0}^{p} A_k Y^k(z)$.

3. При выборе уравнения для эллиптической функции Вейерштрасса задание усеченного разложения в виде $y(z) = A_0 + \sum_{k=0}^{p-2} A_{k+1}\dfrac{d^kY}{dz^k}$ при $p \geq 2$ и $y(z) = A_0 + A_1\dfrac{Y'(z)}{Y(z)}$ при $p = 1$.

4. Подстановка усеченного разложения в исходное уравнение.

5. Подстановка в полученное уравнение выражений для старших производных $Y(z)$ в зависимости от выбранного простейшего уравнения.

6. Приравнивание нулю коэффициентов при одинаковых степенях $Y(z)$ и, при наличии, $Y'(z)$.

7. Решение полученной алгебраической системы уравнений встроенной функцией *solve()* с учетом параметров *ode*, выбранных пользователем.

8. Исключение из системы тривиальных и вырожденных случаев.

9. Проверка полученных решений путем подстановки в исходное уравнение.

10. Вывод найденных точных решений.

3. ПРИМЕРЫ ПРИМЕНЕНИЯ ПРОГРАММЫ AFES

3.1. Построение точных решений уравнения Курамото–Сивашинского

Для проверки работы программы AFES рассматривается уравнение Курамото–Сивашинского в переменных бегущей волны

$$y_{zzz} + \sigma y_{zz} + y_z + \frac{1}{2}y^2 - C_0 y + C_1 = 0. \qquad (6)$$

В случае, если в качестве простейшего уравнения выбрать уравнение Риккати, дополнительно в качестве входных данных для программы необходимо указать параметры σ и C_1. На выходе программы имеется десять известных решений в виде уединенных волн и сингулярных решений.

1. $$y_1(z) = C_0 - \frac{135\tanh\left(\frac{\sqrt{11}\sqrt{19}(z+\varphi)}{38}\right)\sqrt{11}\sqrt{19}}{361} + \frac{165\tanh\left(\frac{\sqrt{11}\sqrt{19}(z+\varphi)}{38}\right)^3\sqrt{11}\sqrt{19}}{361}, \qquad (7)$$

$$C_1 = -\frac{4950}{6859} + \frac{C_0^2}{2}, \quad \sigma = 0;$$

2. $$y_2(z) = \frac{\left(-15\tan\left(\frac{\sqrt{19}(z+\varphi)}{38}\right)^3 - 45\tan\left(\frac{\sqrt{19}(z+\varphi)}{38}\right)\right)\sqrt{19}}{361} + C_0, \quad C_1 = \frac{450}{6859} + \frac{C_0^2}{2}, \quad \sigma = 0; \tag{8}$$

3. $$y_3(z) = -11 + C_0 - 15\tan\left(\frac{\varphi}{2}+\frac{z}{2}\right) - 15\tan\left(\frac{\varphi}{2}+\frac{z}{2}\right)^2 - 15\tan\left(\frac{\varphi}{2}+\frac{z}{2}\right)^3, \tag{9}$$
$$C_1 = -8 + \frac{C_0^2}{2}, \quad \sigma = 4;$$

4. $$y_4(z) = -9 + C_0 - 15\tanh\left(\frac{\varphi}{2}+\frac{z}{2}\right) + 15\tanh\left(\frac{\varphi}{2}+\frac{z}{2}\right)^2 + 15\tanh\left(\frac{\varphi}{2}+\frac{z}{2}\right)^3, \tag{10}$$
$$C_1 = -18 + \frac{C_0^2}{2}, \quad \sigma = -4;$$

5. $$y_5(z) = 9 + C_0 - 15\tanh\left(\frac{\varphi}{2}+\frac{z}{2}\right) - 15\tanh\left(\frac{\varphi}{2}+\frac{z}{2}\right)^2 + 15\tanh\left(\frac{\varphi}{2}+\frac{z}{2}\right)^3, \tag{11}$$
$$C_1 = -18 + \frac{C_0^2}{2}, \quad \sigma = 4;$$

6. $$y_6(z) = 11 + C_0 - 15\tan\left(\frac{\varphi}{2}+\frac{z}{2}\right) + 15\tan\left(\frac{\varphi}{2}+\frac{z}{2}\right)^2 - 15\tan\left(\frac{\varphi}{2}+\frac{z}{2}\right)^3, \tag{12}$$
$$C_1 = -8 + \frac{C_0^2}{2}, \quad \sigma = -4;$$

7. $$y_7(z) = C_0 - \frac{45\sqrt{47}}{2209} + \frac{45\tanh\left(\frac{\sqrt{47}(\varphi+z)}{94}\right)\sqrt{47}}{2209} + \frac{45\sqrt{47}\tanh\left(\frac{\sqrt{47}(\varphi+z)}{94}\right)^2}{2209} + \frac{15\tanh\left(\frac{\sqrt{47}(\varphi+z)}{94}\right)^3\sqrt{47}}{2209}, \tag{13}$$
$$C_1 = \frac{C_0^2}{2} - \frac{1800}{103\,823}, \quad \sigma = -\frac{12\sqrt{47}}{47};$$

8. $$y_8(z) = C_0 + \frac{45\sqrt{47}}{2209} + \frac{45\tanh\left(\frac{\sqrt{47}(\varphi+z)}{94}\right)\sqrt{47}}{2209} - \frac{45\sqrt{47}\tanh\left(\frac{\sqrt{47}(\varphi+z)}{94}\right)^2}{2209} + \frac{15\tanh\left(\frac{\sqrt{47}(\varphi+z)}{94}\right)^3\sqrt{47}}{2209}, \tag{14}$$
$$C_1 = \frac{C_0^2}{2} - \frac{1800}{103\,823}, \quad \sigma = \frac{12\sqrt{47}}{47};$$

9. $$y_9(z) = C_0 - \frac{60\sqrt{73}}{5329} + \frac{75\tanh\left(\frac{\sqrt{73}(\varphi+z)}{146}\right)\sqrt{73}}{5329} + \frac{60\sqrt{73}\tanh\left(\frac{\sqrt{73}(\varphi+z)}{146}\right)^2}{5329} + \frac{15\tanh\left(\frac{\sqrt{73}(\varphi+z)}{146}\right)^3\sqrt{73}}{5329}, \tag{15}$$
$$C_1 = \frac{C_0^2}{2} - \frac{4050}{389\,017}, \quad \sigma = -\frac{16\sqrt{73}}{73};$$

10. $$y_{10}(z) = C_0 + \frac{60\sqrt{73}}{5329} + \frac{75\tanh\left(\frac{\sqrt{73}(\varphi+z)}{146}\right)\sqrt{73}}{5329} - \frac{60\sqrt{73}\tanh\left(\frac{\sqrt{73}(\varphi+z)}{146}\right)^2}{5329} + \frac{15\tanh\left(\frac{\sqrt{73}(\varphi+z)}{146}\right)^3\sqrt{73}}{5329}, \tag{16}$$
$$C_1 = \frac{C_0^2}{2} - \frac{4050}{389\,017}, \quad \sigma = \frac{16\sqrt{73}}{73}.$$

В случае, если в качестве простейшего уравнения выбрать уравнение для эллиптической функции Вейерштрасса, дополнительно в качестве входных данных для программы необходимо указать параметр σ. На выходе программы имеется два известных периодических решения

$$\begin{gathered} y_{1,2}(z) = C_0 \mp 1 \mp \\ \mp 60\wp\left(\varphi + z, \frac{1}{12}, -\frac{C_0^2}{2160} + \frac{13}{1080} + \frac{C_1}{1080}\right) - \\ -60\wp_z\left(\varphi + z, \frac{1}{12}, -\frac{C_0^2}{2160} + \frac{13}{1080} + \frac{C_1}{1080}\right), \\ \sigma = \pm 4. \end{gathered} \tag{17}$$

Таким образом, программа AFES успешно проходит проверку для уравнения Курамото–Сивашинского.

3.2. Построение точных решений уравнений, описывающих распространение сигналов в оптическом волокне

Рассматривается уравнение, описывающее распространение импульсов в оптическом волокне [21]

$$\begin{gathered} a_1 y_{zz} + a_2 y^2 + \frac{a_3}{y^3} + a_4 y^{2n+1} + \\ + a_5 y^{n+1} + a_6 y^{1-n} + a_7 y^{1-2n} = 0. \end{gathered} \tag{18}$$

Уравнение (18) получено путем перехода к переменным бегущей волны в уравнении Шредингера с нелинейностью произвольной степени. Производится поиск периодических решений уравнения (18) в случае $n = 1$. На выходе программы имеется решение

$$\begin{gathered} y(z) = \frac{\sqrt{-6a_1a_2}\wp_z(z + C, g_2, 0) - 2a_2\wp(z + C, g_2, 0)}{2a_5\wp(z + C, g_2, 0)}, \\ a_3 = 0, \quad a_4 = \frac{a_5^2}{3a_2}, \quad a_6 = \frac{a_2^2}{3a_5}, \quad a_7 = 0. \end{gathered} \tag{19}$$

Решение (18) содержит две произвольные константы, поэтому является общим решением для уравнения (18). Таким образом, в ситуации, когда исходное уравнение можно привести к уравнению для эллиптических функций, программа позволяет искать общие решения таких уравнений.

В работе [3] приводятся примеры нелинейных неинтегрируемых обыкновенных дифференциальных уравнений четвертого и шестого порядков для описания распространения импульсов в оптическом волокне. Особенностью этих уравнений является тот факт, что все они имеют одно общее точное решение, выраженное при помощи эллиптических функций. Рассматриваются два дифференциальных уравнения четвертого порядка и осуществляется поиск точных решений при помощи программы AFES. Одно из уравнений имеет вид

$$\begin{gathered} y_{zzzz} - 6ay^2 y_{zz} - cy_{zz} - 12a^2 y^5 - \\ - 12acy^3 - 12aC_1 y = 0. \end{gathered} \tag{20}$$

Другое уравнение четвертого порядка

$$y_{zzzz} - cy_{zz} - 24a^2 y^5 - 18acy^3 - 12aC_1 y = 0. \tag{21}$$

При помощи программы AFES не удается найти точные решения уравнений (20), (21) без дополнительного преобразования $y(z) = \sqrt{v(z)}$. После указанной замены получается одно общее для двух уравнений точное решение

$$\begin{gathered} y(z) = \\ = \sqrt{\frac{-c + 3\wp\left(z + \varphi, -4aC_1 + \frac{4c^2}{3}, \frac{4}{3}C_1 ac - \frac{8}{27}c^3\right)}{3a}}. \end{gathered} \tag{22}$$

Удалось найти новое точное решение для уравнения (20)

$$y(z) = \sqrt{\frac{-11c - 48\wp\left(z + \varphi, -4aC_1 + \frac{781c^2}{768}, -\frac{11}{12}C_1 ac + \frac{20449}{110592}c^3\right)}{24a}} \tag{23}$$

и новое точное решение для уравнения (21)

$$y(z) = \sqrt{\frac{-4c - 15\wp\left(z + \varphi, -4aC_1 + \frac{4c^2}{3}, -\frac{16}{15}C_1 ac + \frac{944}{3375}c^3\right)}{15a}}. \tag{24}$$

Таким образом, помимо общих друг для друга точных решений уравнения (20), (21) имеют различные невырожденные точные периодические решения.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представлен алгоритм программы AFES для построения точных решений обыкновенных дифференциальных уравнений полиномиального вида. Программа AFES успешно проходит проверку для уравнения Курамото–Сивашинского. В случае уравнений для описания распространения импульсов в оптическом волокне показано, что при помощи программы AFES для некоторых уравнений могут быть найдены общие решения.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 18-11-00209).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Kudryashov N.A.* Periodic and solitary waves of the Biswas–Arshed equation // Optik, 2020. V. 200. P. 163442.
2. *Kudryashov N.A.* The Painleve approach for finding solitary wave solutions of nonlinear nonintegrable differential equations // Optik, 2019. V. 183. P. 642–649.
3. *Kudryashov N.A.* Construction of nonlinear differential equations for description of propagation pulses in optical fiber // Optik, 2019. V. 192. P. 162964.
4. *Kuramoto Y., Tsuzuki T.* Persistent propagation of concentration waves in dissipative media far from thermal equilibrium // Prog. Theor. Phys., 1976. V. 55. № 2. P. 356–369.
5. *Sivashinsky G.I.* Instabilities, pattern formation, and turbulence in flames // Annu. Rev. Fluid Mech., 1983. V. 15. № 1. P. 179–199.
6. *Aspe H., Depassier M.C.* Instabilities, pattern formation, and turbulence in flames // Phys. Rev. A., 1990. V. 41. I. 6. P. 3125–3128.
7. *Parkes E.J., Duffy B.R.* An automated tanh-function method for finding solitary wave solutions to non-linear evolution equations // Comput. Phys. Commun., 1996. V. 98. I. 3. P. 288–300.
8. *Liang S., Jeffrey D.J.* Automatic computation of the travelling wave solutions to nonlinear PDEs // Comput. Phys. Commun., 2008. V. 178. I. 9. P. 700–712.
9. *He J.-H., Wu X.-H.* Exp-function method for nonlinear wave equations // Chaos, Solitons & Fractals, 2006. V. 30. I. 3. P. 700–708.
10. *Wang M., Li X., Zhang J.* The (G'/G)-expansion method and travelling wave solutions of nonlinear evolution equations in mathematical physics // Phys. Lett. A., 2008. V. 372. I. 4. P. 417–423.
11. *Kudryashov N.A.* Method of the Logistic Function for Finding Analytical Solutions of Nonlinear Differential Equations // Modeling and Analysis of Information Systems, 2015. V. 22. I. 1. P. 23–37.
12. *Kudryashov N.A.* Simplest equation method to look for exact solutions of nonlinear differential equations // Chaos, Solitons & Fractals, 2005. V. 24. I. 5. P. 1217–1231.
13. *Кудряшов Н.А.* Методы нелинейной математической физики // Издательский дом “Интеллект”, 2010. 368 с.
14. *Kudryashov N.A.* A note on the G’/G-expansion method // Appl. Math. Comput., 2010. V. 217. I. 4. P. 1755–1758.
15. *Kudryashov N.A.* Seven common errors in finding exact solutions of nonlinear differential equations // Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul., 2009. V. 14. I. 9–10. P. 3507–3529.
16. *Kudryashov N.A.* Be careful with the Exp-function method // Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul., 2009. V. 14. I. 5. P. 1881–1890.
17. *Кудряшов Н.А., Кутуков А.А.* Программа построения точных решений нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений в полиномиальной форме // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ, 2019. № 2019661587.
18. *Кудряшов Н.А., Кутуков А.А.* Автоматизация построения многоугольников Ньютона, соответствующих обыкновенным дифференциальным уравнениям полиномиального вида // Вестник НИЯУ “МИФИ”, 2019. Т. 8. №3. С. 284–289.
19. *Кудряшов Н.А., Кутуков А.А.* Программа для построения многоугольников Ньютона, соответствующих обыкновенным дифференциальным уравнениям полиномиального вида // Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ, 2019. № 2019617572.
20. *Брюно А.Д.* Асимптотики и разложения решений обыкновенного дифференциального уравнения // Успехи мат. наук, 2004. Т. 59. Вып. 3. С. 31–80.
21. *Kudryashov N.A.* A generalized model for description of propagation pulses in optical fiber // Optik, 2019. V. 189. P. 42–52.

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI", 2019, vol. 8, no. 6, pp. 533–539

Automation of the Construction of Exact Solutions of Nonlinear Differential Equations

N. A. Kudryashov[a,#] and A. A. Kutukov[a,##]

[a] *National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia*

[#]*e-mail: nakudr@gmail.com*

[##]*e-mail: alexkutuk@gmail.com*

Received October 9, 2019; revised October 9, 2019; accepted October 15, 2019

Abstract—The AFES program (automatic finding exact solutions) designed to find exact solutions of polinomial ordinary differential equations has been described. The simplest equations method has been used to find exact solutions. The method consists in constructing exact solutions of differential equations using a general solution of a lower order differential equation. In order to choose the form of the exact solution, it is necessary to determine the pole order of the solution of the original equation and the pole order of the solution of the simplest equation. The program for automatically constructing Newton polygons ACNP (automatic construction of Newton polygons) has been used. The Riccati equation and the equation for the elliptic Weierstrass function have been considered as simple equations. In order to test the program, examples of constructing exact solutions of various nonlinear differential equations are given. The AFES program is written in the Maple computer algebra system. The algorithm of the program and examples of its application are given. The AFES program has several advantages over well-known programs for finding exact solutions of differential equations. In particular, constructed exact solutions are different and they cannot be transformed to each other.

Keywords: simple equations method, exact solutions, nonlinear differential equations, computer algebra system

DOI: 10.1134/S2304487X19060038

REFERENCES

1. Kudryashov N.A. Periodic and solitary waves of the Biswas–Arshed equation, *Optik*, 2020, vol. 200, pp. 163442.
2. Kudryashov N.A. The Painleve approach for finding solitary wave solutions of nonlinear nonintegrable differential equations, *Optik*, 2019, vol. 183, pp. 642–649.
3. Kudryashov N.A. Construction of nonlinear differential equations for description of propagation pulses in optical fiber, *Optik*, 2019, vol. 192, pp. 162964.
4. Kuramoto Y., Tsuzuki T. Persistent propagation of concentration waves in dissipative media far from thermal equilibrium, *Prog. Theor. Phys.*, 1976, vol. 55, no. 2, pp. 356–369.
5. Sivashinsky G.I. Instabilities, pattern formation, and turbulence in flames, *Annu. Rev. Fluid Mech.*, 1983, vol. 15, no. 1, pp. 179–199.
6. Aspe H., Depassier M.C. Instabilities, pattern formation, and turbulence in flames, *Phys. Rev. A*, 1990, vol. 41, i. 6, pp. 3125–3128.
7. Parkes E.J., Duffy B.R. An automated tanh-function method for finding solitary wave solutions to non-linear evolution equations, *Comput. Phys. Commun.*, 1996, vol. 98, i. 3, pp. 288–300.
8. Liang S., Jeffrey D.J. Automatic computation of the travelling wave solutions to nonlinear PDEs, *Comput. Phys. Commun.*, 2008, vol. 178, i. 9, pp. 700–712.
9. He J.-H., Wu X.-H. Exp-function method for nonlinear wave equations, *Chaos, Solitons & Fractals*, 2006, vol. 30, i. 3, pp. 700–708.
10. Wang M., Li X., Zhang J. The (G'/G)-expansion method and travelling wave solutions of nonlinear evolution equations in mathematical physics, *Phys. Lett. A*, 2008, vol. 372, i. 4, pp. 417–423.
11. Kudryashov N.A. Method of the Logistic Function for Finding Analytical Solutions of Nonlinear Differential Equations, *Modeling and Analysis of Information Systems*, 2015, vol. 22, i. 1, pp. 23–37.
12. Kudryashov N.A. Simplest equation method to look for exact solutions of nonlinear differential equations, *Chaos, Solitons & Fractals*, 2005, vol. 24, i. 5, pp. 1217–1231.
13. Kudryashov N.A. *Metody nelinejnoj matematicheskoj fiziki* [Methods of nonlinear mathematical physics]. Izdatelskii dom Intellekt, 2010, 368 p.

14. Kudryashov N.A. A note on the G'/G-expansion method, *Appl. Math. Comput.*, 2010, vol. 217, i. 4, pp. 1755–1758.
15. Kudryashov N.A. Seven common errors in finding exact solutions of nonlinear differential equations, *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.*, 2009, vol. 14, i. 9-10, pp. 3507–3529.
16. Kudryashov N.A. Be careful with the Exp-function method, *Commun. Nonlinear Sci. Numer. Simul.*, 2009, vol. 14, i. 5, pp. 1881–1890.
17. Kudryashov N.A., Kutukov A.A. *Programma postroeniya tochnyh reshenij nelinejnykh obyknovennykh differentsial'nykh uravnenii v polinomialnoi forme* [The program for constructing exact solutions of nonlinear ordinary differential equations in polynomial form]. Certificate of RF registration of a computer program, no. 2019661587, 2019.
18. Kudryashov N.A., Kutukov A.A. Automatic construction of Newton polygons corresponding to polynomial ordinary differential equations. *Vestnik NIYaU MIFI*, 2019, vol. 8, no. 3, pp. 284–289 (in Russian).
19. Kudryashov N.A., Kutukov A.A. *Programma dlya postroeniya mnogougol'nikov N'yutona, sootvetstvuyushchih obyknovennym differentsial'nym uravneniyam polinomial'nogo vida* [The program for constructing Newton polygons corresponding to ordinary differential equations of polynomial form]. Certificate of RF registration of a computer program, no. 2019617572, 2019.
20. Bruno A.D. Asymptotics and expansions of solutions of an ordinary differential equation. *Uspekhi mat. nauk*, 2004, vol. 59, no. 3, pp. 31–80 (in Russian).
21. Kudryashov N.A. A generalized model for description of propagation pulses in optical fiber, *Optik*, 2019, vol. 189, pp. 42–52.

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА "МИФИ", 2019, том 8, № 6, с. 540–545

ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ДИНАМИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ

УДК 536.2

ПОЛУЧЕНИЕ АНАЛИТИЧЕСКОГО РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ТЕПЛООБМЕНА ДЛЯ ТУРБУЛЕНТНОГО ПОГРАНИЧНОГО СЛОЯ

А. В. Еремин[1], В. К. Ткачев[1], Т. Б. Тарабрина[1], И. В. Кудинов[1], С. В. Колесников[2]

[1] Самарский государственный технический университет, Самара, 443001, Россия

[2] Филиал "Самарский" ПАО "Т Плюс", Самара, 443100, Россия

**e-mail: tvk93@yandex.ru*

Поступила в редакцию 22.04.2019 г.
После доработки 09.09.2019 г.
Принята к публикации 01.10.2019 г.

На основе определения дополнительной искомой функции (ДИФ) и дополнительных граничных (ДГУ) условий получено приближенное аналитическое решение задачи теплообмена в турбулентном пограничном слое для граничных условий первого рода. В качестве дополнительной искомой функции принимается соотношение, характеризующее изменение толщины теплового пограничного слоя от продольной переменной. Ее использование позволяет сводить уравнение в частных производных к обыкновенному дифференциальному уравнению. ДГУ принимаются в виде, при котором их удовлетворение искомым решением адекватно удовлетворению уравнения в точках границы. Применительно к получению решения задачи для теплового турбулентного слоя использовались эмпирические формулы профиля скорости и его толщины в турбулентном динамическом пограничном слое. Из анализа результатов можно заключить, что ряд полученного решения быстро сходится, о чем свидетельствует практическое совпадение результатов третьего и четвертого приближений.

Рассмотренный в работе метод ДГУ может быть эффективно использован для решения и более сложных краевых задач с дифференциальными уравнениями, не допускающими разделения переменных (нелинейными, с переменными физическими свойствами среды, с учетом диссипации энергии и др.).

Ключевые слова: турбулентный тепловой пограничный слой, аналитическое решение, ДИФ, ДГУ, интегральный метод

DOI: 10.1134/S2304487X19060026

Трудности решения уравнений пограничного слоя обусловлены их нелинейностью. Их точные решения пока не получены – найдены лишь численные решения [1]. Известным приближенным аналитическим методом, использующимся для решения задач применительно динамическому и тепловому пограничным слоям, является интегральный метод. Однако применительно к данным задачам при его использовании получены решения лишь в первом приближении, точность которого недостаточна для выполнения как научных исследований, так и для практических приложений [1–12].

В работах [9–12] для интегральных уравнений Т. Кармана и Г.Н. Кружилина применительно к динамическому и тепловому пограничным слоям, при использовании ДГУ получены аналитические решения уравнений Л. Прандтля и Польгаузена соответственно для динамического и теплового ламинарных пограничных слоев. Однако режим течения жидкости в пограничном слое может быть не только ламинарным, но и турбулентным. Переход ламинарного режима к турбулентному происходит на расстоянии $x_{кр}$ от кромки пластины, которое определяется из критического значения числа Рейнольдса. Ввиду отсутствия информации о характере смыкания турбулентного пограничного слоя с ламинарным вязким подслоем, всегда существующим вблизи стенки, а также о законе трения в этой переходной зоне, теоретические методы расчета распределения скорости в турбулентном пограничном слое и его толщины пока не разработаны. В связи с чем, для определения этих величин используются эмпирические зависимости [1–7]

$$v_x/v = (y/\delta)^{1/n}; \quad (1)$$

$$\delta(x) = 0.375x/\mathrm{Re}_x^{0.2}, \quad (2)$$

где $n = 6$ при $\mathrm{Re} = 40\times10^3$; $n = 7$ при $\mathrm{Re} = 110\times10^3$; $n = 10$ при $\mathrm{Re} = 3240\times10^3$; v_x –

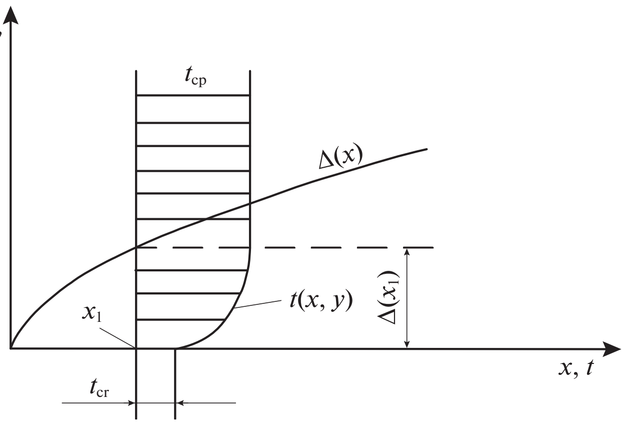

Рис. 1. Схема теплового пограничного слоя при $t_{ст} < t_{ср}$. $t_{ст}$ – температура стенки; $t_{ср}$ – температура невозмущенного потока; $\Delta(x)$ – толщина пограничного слоя; $\Delta(x_1)$ – толщина пограничного слоя в точке $x = x_1$.

распределение скорости в турбулентном динамическом пограничном слое; $\delta(x)$ – толщина турбулентного динамического слоя; $\mathrm{Re}_x = vx/\nu$ – число Рейнольдса, в котором в качестве характерного размера принято расстояние x [1–7]; ν – коэффициент кинематической вязкости.

Математическая постановка задачи для турбулентного теплового пограничного слоя имеет вид [1–7, 10] (рис. 1)

$$v_x \frac{\partial t(x,y)}{\partial x} + v_y \frac{\partial t(x,y)}{\partial y} = a_э \frac{\partial^2 t(x,y)}{\partial y^2}; \qquad (3)$$

$$t(x,0) = t_{ст}; \qquad (4)$$

$$t(x,\Delta) = t_{ср}; \qquad (5)$$

$$\partial t(x,\Delta)/\partial y = 0, \qquad (6)$$

где v_x, v_y – составляющие скорости по координатным осям x и y; $t(x,y)$ – температура в пограничном слое; $\Delta(x)$ – толщина пограничного слоя; $t_{ст}$ – температура стенки; $t_{ср}$ – температура невозмущенного потока; $a_э = a + a_т$ – эквивалентный коэффициент температуропроводности; a – коэффициент молекулярной температуропроводности жидкости; $a_т$ – коэффициент турбулентной температуропроводности, характеризующий не физическое свойство жидкости, а режим ее течения.

Для нахождения как можно более точного решения задачи (3)–(6) необходимо использовать дополнительные граничные условия. Первое такое условие применительно к точке $y = 0$, где $v_x = v_y = 0$, находится из уравнения (3) и имеет вид

$$\partial^2 t(x,0)/\partial y^2 = 0. \qquad (7)$$

Потребуем удовлетворения искомым решением уравнения (3), осредненного по толщине пограничного слоя

$$\int_0^\Delta v_x \frac{\partial t(x,y)}{\partial x} dy + \int_0^\Delta v_y \frac{\partial t(x,y)}{\partial y} dy = a_э \int_0^\Delta \frac{\partial^2 t(x,y)}{\partial y^2} dy. \qquad (8)$$

Вычислив интегралы в (8), получим [5]

$$\frac{d}{dx}\int_0^\Delta v_x[t_{ср} - t(x,y)]dy = a_э \frac{\partial t(x,0)}{\partial y}. \qquad (9)$$

Последнее уравнение, исходя из баланса по тепловым потокам, получено также Кружилиным Г.Н. [6].

Рассмотрим избыточную температуру $T = t - t_{ст}$. Уравнение (9) и условия (4)–(6) относительно этой температуры будут

$$\frac{d}{dx}\int_0^\Delta v_x[T_{ср} - T(x,y)]\,dy = a_э \frac{\partial T(x,0)}{\partial y}, \qquad (10)$$

$$T(x,0) = 0; \qquad (11)$$

$$T(x,\Delta) = T_{ср}; \qquad (12)$$

$$\partial T(x,\Delta)/\partial y = 0; \qquad (13)$$

$$\partial^2 T(x,0)/\partial y^2 = 0, \qquad (14)$$

где $T_{ср} = t_{ср} - t_{ст}$.

Ввиду того, что толщины динамического и теплового слоев должны подчиняться условию $\Delta(x) \le \delta(x)$ [1–7], то критерий Прандтля должен быть $\mathrm{Pr} \ge 1$. Это условие выполняется для газов ($\mathrm{Pr} \approx 0.75$), жидкостей ($\mathrm{Pr} > 1$), и не выполняется применительно жидким металлам ($10^{-3} \le \mathrm{Pr} \le 10^{-2}$).

Решение задачи (10)–(14) принимается в виде

$$T(x,y) = \sum_{k=1}^{n} a_k(\Delta) y^{2k-1}, \qquad (15)$$

где $a_k(\Delta(x))$ – неизвестные коэффициенты; $\Delta(x)$ – толщина турбулентного теплового пограничного слоя, представляющая дополнительную искомую функцию.

Очевидно, что соотношение (15) удовлетворяет граничным условиям (11), (14). Неизвестные константы $a_k(\Delta)$ находятся из условий (12), (13). Подставляя (15), ограничиваясь двумя членами ряда, в (12), (13), относительно коэффициентов $a_k(\Delta)$, ($k = 1, 2$) получим два алгебраических уравнения. Их решение: $a_1(\Delta) = 1.5T_{ср}/\Delta$; $a_2(\Delta) = -0.5T_{ср}/\Delta^3$. Соотношение (15) с учетом найденных значений коэффициентов $a_k(\Delta)$ принимает вид

$$\frac{T}{T_{ср}} = \frac{3y}{2\Delta}\left(1 - \frac{y^2}{3\Delta^2}\right). \qquad (16)$$

Подставляя (1) и (16) в (10), относительно толщины турбулентного теплового пограничного слоя получаем следующее обыкновенное дифференциальное уравнение

$$vT_{\text{ср}}\frac{343}{1160}\frac{d}{dx}[\beta^{8/7}\delta(x)] = a_{\text{э}}\frac{3}{2}\frac{T_{\text{ср}}}{\beta\delta(x)}, \quad (17)$$

где $\beta = \Delta(x)/\delta(x)$, а величина n в формуле (1) принята равной 7.

Так как величина β не зависит от переменной x [2–5], уравнение (15) можно представить в виде

$$686v\beta^{15/7}\delta(x)\frac{d\delta(x)}{dx} = 3480a_{\text{э}}, \quad (18)$$

где $\delta(x)$ определяется по формуле (2).

Независимость величины β от координаты x объясняется полной идентичностью математических постановок краевых задач для динамического и теплового пограничных слоев, представленных в безразмерном виде. Это означает, что безразмерные решения этих задач будут одинаковы, а размерные – взаимно подобны. Следовательно, отношение толщин теплового и динамического пограничных слоев будет неизменным по координате x [2–6].

Подставляя (2) в (18), находим

$$\Delta(x) = \frac{1.99625}{x^6 v^7}\frac{(a_{\text{э}}\text{Re}^{2/5}v^{14}x^{14})^{7/15}}{\text{Re}_x^{1/5}}. \quad (19)$$

Соотношения (16), (19) будут решением задачи (10)–(14) для первого приближения применительно к тепловому турбулентному пограничному слою. Расчеты температуры $\Theta = T/T_{\text{ср}} = (t - t_{cm})/(t_{cp} - t_{cm})$ по соотношению (16) приводятся на рис. 2. Здесь же приведены результаты расчетов теплового ламинарного пограничного слоя, полученные в [9–12].

Повышение точности связано с использованием ДГУ. Метод их получения детально рассмотрен в [9–12]. И, в частности, уравнение (3) применительно к точке $y = \Delta(x)$ с учетом (6) приводится к виду

$$\frac{\partial t(x,\Delta)}{\partial x} = \frac{a_{\text{э}}}{v_x}\frac{\partial^2 t(x,\Delta)}{\partial y^2}. \quad (20)$$

Дифференцируя (5) по x, с учетом (20) находим дополнительное граничное условие вида

$$\partial^2 t(x,\Delta)/\partial y^2 = 0. \quad (21)$$

Дифференцируя уравнение (3) по переменной y, применительно к точке $y = 0$ находим

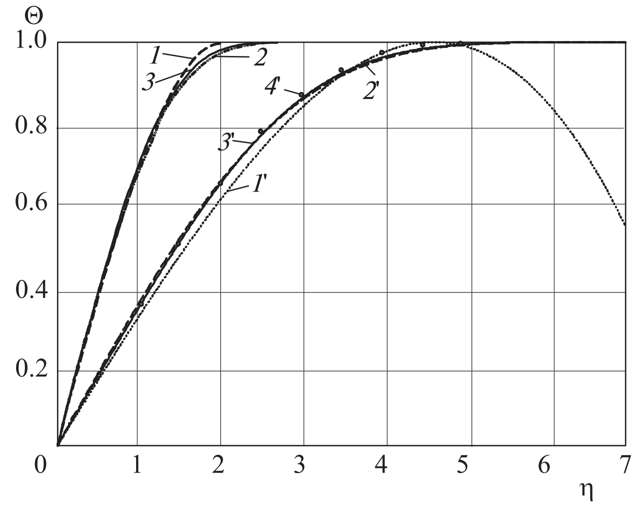

Рис. 2. Распределение безразмерной температуры: *1, 2, 3* – 1-ое, 2-ое, 3-е приближения (турбулентное течение); *1', 2', 3'* – 1-ое, 2-ое, 3-е приближение (ламинарное движение); *4'* – точное решение (ламинарное движение); $\eta = y\sqrt{v/(vx)}$.

$$\frac{\partial v_x}{\partial y}\frac{\partial t(x,0)}{\partial x} + v_x\frac{\partial^2 t(x,0)}{\partial x\partial y} + \frac{\partial v_y}{\partial y}\frac{\partial t(x,0)}{\partial y} + v_y\frac{\partial^2 t(x,0)}{\partial y^2} = a_{\text{э}}\frac{\partial^3 t(x,0)}{\partial y^3}. \quad (22)$$

Выражение (22), с учетом (6), (7), а также того, что $\frac{\partial v_x}{\partial x} = \frac{\partial v_y}{\partial y} = 0$ (так как $v_x(0,x) = v_y(0,x) = 0$), будет

$$\frac{\partial^2 t(x,0)}{\partial x\partial y} = \frac{a_{\text{э}}}{v_x}\frac{\partial^3 t(x,0)}{\partial y^3}. \quad (23)$$

Дифференцируя (6) по x и, сравнивая с (23), получаем третье ДГУ

$$\partial^3 t(x,0)/\partial y^3 = 0. \quad (24)$$

Во втором приближении, подставив (15), в (12), (13), (21), (24) для неизвестных постоянных a_k, $(k = \overline{1,4})$ получим систему, включающую четыре алгебраических уравнения (все ДГУ для функций T и t идентичны). Подставляя найденные из решения этой системы постоянные a_k в (15), будем иметь

$$\frac{T(x,y)}{T_{\text{ср}}} = \frac{35}{24}\frac{y}{\delta} - \frac{7}{8}\left(\frac{y}{\Delta}\right)^5 + \frac{5}{12}\left(\frac{y}{\Delta}\right)^7. \quad (25)$$

Подставляя (25), (1) в (10), находим

$$v\frac{16\,807}{58\,824}\frac{d}{dx}[\beta^{8/7}\delta(x)] = \frac{35a_{\text{э}}}{24\beta\delta(x)}. \quad (26)$$

Ввиду независимости β от x, уравнение (26) запишется в виде

$$\frac{16\,807}{58\,824}v\beta^{15/7}\delta(x)\frac{d\delta(x)}{dx}=\frac{35}{24}a_э, \tag{27}$$

где $\delta(x)$ находится по соотношению (2).

Подставив (2) в (27), получим

$$\Delta(x)=\frac{2.0025}{x^6v^7}\frac{(a_э\mathrm{Re}_x^{2/5}vv^{14}x^{14})^{7/15}}{\mathrm{Re}_x^{1/5}}. \tag{28}$$

Соотношение (25), учитывая (28), будет решением для второго приближения. Расчеты по формуле (25) приводятся на рис. 2. Из их анализа видно, что решение во втором приближении, в сравнении с первым, уточняется на 3%.

Для нахождения ДГУ третьего приближения продифференцируем уравнение (3) по y и представим его для точки $y=\Delta(x)$:

$$\frac{\partial v_x}{\partial y}\frac{\partial t(x,\Delta)}{\partial x}+v_x\frac{\partial^2 t(x,\Delta)}{\partial x\partial y}+\frac{\partial v_y}{\partial y}\frac{\partial t(x,\Delta)}{\partial y}+ \\ +v_y\frac{\partial^2 t(x,\Delta)}{\partial y^2}=a\frac{\partial^3 t(x,\Delta)}{\partial y^3}. \tag{29}$$

Продифференцируем условие (5) по переменным x и y:

$$\partial t(x,\Delta)/\partial x=0;\quad \partial t(x,\Delta)/\partial y=0. \tag{30}$$

Соотношение (29) с учетом (3), (7), (30) приводится к следующему ДГУ

$$\partial^3 t(x,\Delta)/\partial y^3=0. \tag{31}$$

Посредством дифференцирования (3) по y и сравнения его с основными и ДГУ, продифференцированными по x и y, можно найти какое угодно количество ДГУ. Для точки $y=\Delta(x)$ следующие ДГУ будут

$$\partial^4 t(x,\Delta)/\partial y^4=0; \tag{32}$$

$$\partial^5 t(x,\Delta)/\partial y^5=0. \tag{33}$$

Основные (5), (6) и дополнительные (21), (24), (31), (32) условия позволяют найти шесть неизвестных постоянных $a_k(\Delta)$, $(k=\overline{1,6})$ соотношения (15). Подставляя (15) в перечисленные условия, для неизвестных коэффициентов $a_k(\Delta)$ получим систему, включающую шесть алгебраических линейных уравнений. После нахождения неизвестных постоянных $a_k(\Delta)$ соотношение (15) принимает вид

$$\frac{T(x,y)}{T_{ср}}=\frac{231}{128}\frac{y}{\delta}-\frac{231}{64}\left(\frac{y}{\Delta}\right)^5+\frac{165}{32}\left(\frac{y}{\Delta}\right)^7- \\ -\frac{385}{128}\left(\frac{y}{\Delta}\right)^9+\frac{21}{32}\left(\frac{y}{\Delta}\right)^{11}. \tag{34}$$

Подставляя (34) в уравнение (10), для неизвестной функции $\Delta(x)$ получаем обыкновенное дифференциальное уравнение вида

$$v\frac{9\,058\,973}{39\,444\,760}\frac{d}{dx}[\beta^{8/7}\delta(x)]=\frac{231a_э}{128\beta\delta(x)}. \tag{35}$$

С учетом того, что $\beta=\Delta(x)/\delta(x)$ не зависит от переменной x, находим

$$\frac{9\,058\,973}{39\,444\,760}v\beta^{15/7}\delta(x)\frac{d\delta(x)}{dx}=\frac{231}{128}a_э, \tag{36}$$

где $\delta(x)$ определяется по формуле (2).

Подставляя (2) в (36), получаем

$$\Delta(x)=\frac{2.4492}{x^6v^7}\frac{(a_э\mathrm{Re}_x^{2/5}v^{14}x^{14})^{7/15}}{\mathrm{Re}_x^{1/5}}. \tag{37}$$

Соотношение (34), учитывая (37) будет решением для третьего приближения. Анализ результатов позволяет заключить, что их расхождение для второго и третьего приближений не превышает 1%. Исследования показали, что результаты третьего и четвертого приближений практически совпадают, что свидетельствует о сходимости приближений.

ВЫВОДЫ

1. С использованием математической модели теплового пограничного слоя путем определения ДИФ и ДГУ получено приближенное аналитическое решение исходных дифференциальных уравнений пограничного слоя. Дополнительная искомая функция представляет зависимость толщины пограничного слоя от продольной переменной. Ее использование позволяет сводить уравнение в частных производных к интегрированию обыкновенного дифференциального уравнения. ДГУ находятся в виде, при котором их выполнение искомым решением эквивалентно удовлетворению уравнения в точке границы и на фронте возмущения. Расчеты показывают, что удовлетворение уравнения в точках границы приводит к его удовлетворению и внутри пограничного слоя.

2. Ввиду отсутствия необходимости интегрирования уравнения в частных производных по поперечной пространственной переменной, ограничиваясь интегрированием обыкновенного уравнения для ДИФ, данный метод эффективен применительно к решению задач с уравнениями, которые не допускают разделения переменных (нелинейные, с переменными физическими свойствами, с учетом диссипации энергии и др.).

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-38-00029 мол_а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Шлихтинг Г.* Теория пограничного слоя. М.: Наука, 1969. 742 с.
2. *Прибытков И.А., Левицкий И.А.* Теоретические основы теплотехники. М.: Академия, 2004. 464 с.
3. *Исаев С.И., Кожинов И.А., Кофанов В.И. и др.* Теория теплообмена: Учебник для вузов / Под ред. *Леонтьева А.И.* М.: Высшая школа, 1979. 495 с.
4. *Юдаев Б.Н.* Теплопередача: Учебник для вузов. М.: Высшая школа, 1981. 319 с.
5. *Жуковский В.С.* Основы теплопередачи. М.–Л.: Госэнергоиздат, 1960. 211 с.
6. *Болгарский А.В., Мухачев Г.А., Щукин В.К.* Термодинамика и теплопередача. М.: Высшая школа, 1975. 495 с.
7. *Михеев М.А., Михеева И.М.* Основы теплопередачи. М.: Энергия, 1977. 344 с.
8. *Лойцянский Л.Г.* Механика жидкости и газа. М.: Дрофа, 2003. 840 с.
9. *Стефанюк Е.В., Кудинов В.А.* Получение аналитических решений уравнений гидродинамического и теплового пограничных слоев на основе введения дополнительных граничных условий. Теплофизика высоких температур. 2010. Т. 48. № 2. С. 290–302.
10. *Кудинов И.В., Кудинов В.А., Еремин А.В., Колесников С.В.* Математическое моделирование гидродинамики и теплообмена в движущихся жидкостях. Санкт Петербург: Издательство “Лань”, 2015. 208 с.
11. *Кудинов И.В., Бранфилева А.Н., Еремин А.В., Скворцова М.П.* Моделирование теплообмена в турбулентном пограничном слое с использованием полуэмпирической теории турбулентности. Вестник Самарского государственного технического университета. Серия: Физико-математические науки. 2014. № 4 (37). С. 157–169.
12. *Стефанюк Е.В.* Модельные представления аналитических решений краевых задач теории теплообмена на основе введения дополнительных граничных условий. Диссертация доктора технических наук. Москва. МАТИ, 2010.

Vestnik Natsional’nogo issledovatel’skogo yadernogo universiteta “MIFI”, 2019, vol. 8, no. 6, pp. 540–545

Analytical Solution of a Heat Exchange Problem for Turbulent Boundary Layer

A. V. Eremin[a,#], V. K. Tkachev[a], T. B. Tarabrina[a], I. V. Kudinov[a], and S. V. Kolesnikov[b]

[a] *Samara State Technical University, Samara, 443001 Russia*

[b] *Filial “Samara” PJSC “T Plus”, Samara, 443100 Russia*

[#] *e-mail: tvk93@yandex.ru*

Received April 22, 2019; revised September 9, 2019; accepted October 1, 2019

Abstract—Based on the definition of an additional sought-for function (ASF) and additional boundary conditions (ABC), a highly accurate solution of the heat transfer problem in a turbulent boundary layer for boundary conditions of the first kind was obtained. The relation characterizing the change of the thermal boundary layer thickness that depends on longitudinal variables is taken as an additional sought-for function. The use of this function makes it possible to reduce the partial differential equation to the ordinary differential equation. Additional boundary conditions are accepted in such a form that their satisfying is equal to satisfying an equation at the boundary points. Empirical formulas of the velocity profile and its thickness in the turbulent dynamic boundary layer were used to obtain the solution of the problem for the thermal turbulent layer. Based on the results one can conclude that the thickness of the laminar thermal boundary layer is almost twice the thickness of the turbulent one.

Keywords: turbulent thermal boundary layer, analytical solution, additional sought-for functions, additional boundary conditions, integral method

DOI: 10.1134/S2304487X19060026

REFERENCES

1. Shlihting G. *Teoriya pogranichnogo sloya* [Boundary-layer theory]. Moscow, Nauka, 1969. 742 p.
2. Pribytkov I.A., Levitskiy I.A. *Teoreticheskie osnovy teplotekhniki* [Theoretical basics of heat]. Moscow, Akademiya, 2004. 464 p.
3. Isaev S.I., Kozhinov I.A., Kofanov V.I. i dr. *Teoriya teploobmena* [Heat exchange theory]: Uchebnik dlya vuzov / Pod red. Leontyeva A.I. Moscow, Vysshaya shkola, 1979. 495 p.
4. Yudaev B.N. *Teploperedacha* [Heat transfer]: Uchebnik dlya vuzov, Moscow, Vysshaya shkola, 1981.

5. Zhukovskiy V.S. *Osnovy teorii teploperedachi* [Basic theory of heat transfer]. Moscow–Leningrad, Gosudarstvennoye Energeticheskoye Izdatelstvo, 1960. 211 p.
6. Bolgarskiy A.V., Mukhachev G.A., Shchukin V.K. *Teplodinamika i teploperedacha* [Thermodynamics and heat transfer]. Moscow, Vysshaya shkola, 1975. 495 p.
7. Mikheev M.A., Mikheeva I.M. *Osnovy teploperedachi* [Basic heat transfer]. Moscow, Energiya, 1977. 344 p.
8. Loytsyansky L.G. *Mekhanika zhidkosti i gaza* [Fluid mechanics]. Moscow, Drofa, 2003. 840 p.
9. Stefanyuk E.V., Kudinov V.A. Obtaining analytical solutions of equations of hydrodynamic and thermal boundary layers by means of introduction of additional boundary conditions. *Teplophizika vysokikh temperatur.* 2010. V. 48. № 2. P. 290–302 (in Russian).
10. Kudinov I.V., Kudinov V.A., Eremin A.V., Kolesnikov S.V. *Matematicheskoe modelirovanie gidrodinamiki i teploobmena v dvizhushchikhsya zhidkostyakh* [Mathematical modeling of hydrodynamics and heat transfer in moving fluids]. Sankt-Peterburg, Lan’ Publ., 2015. 208 p.
11. Kudinov I.V., Branfileva A.N., Eremin A.V., Skvortsova M.P. Heat transfer simulation in stirring boundary layer using the semiempirical turbulence theory. *Vestnik Samarskogo gosudarstvennogo tehnicheskogo universiteta. Seriya: Phiziko-matematicheskiye nauki.* 2014. № 4 (37). P. 157–169 (in Russian).
12. Stefanyuk E.V. *Model’nye predstavleniya analiticheskikh reshenii kraevyh zadach teorii teploobmena na osnove vvedeniya dopolnitel’nykh granichnykh usloviy. Diss. dokt. tekhn. nauk* [Model representations of analytical solutions of boundary value problems of heat transfer theory based on the introduction of additional boundary conditions. Dr. eng. sci. diss.]. Moscow, MATI Publ., 2010. 337 p.

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА "МИФИ", 2019, том 8, № 6, с. 546–552

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 621.039.75

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ СРЕДСТВ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ГИДРОДИНАМИКИ ДЛЯ РАСЧЕТА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ГАЗОАЭРОЗОЛЬНЫХ ВЫБРОСОВ В УСЛОВИЯХ СЛОЖНОГО РЕЛЬЕФА

© 2019 г. М. Мехди[1], М. П. Панин[1]

[1] Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", Москва, 115409, Россия

**e-mail: MPPanin@mephi.ru*

Поступила в редакцию 07.10.2019 г.
После доработки 14.10.2019 г.
Принята к публикации 15.10.2019 г.

Средствами пакета ANSYS FLUENT в рамках стандартной (k–ε)-модели турбулентности проведено моделирование обтекания воздушным потоком ряда типичных препятствий (трехмерные куб и полусфера, а также двумерный холм), которые формируют возможный рельеф зоны распространения выбросов АЭС, а также примерно соответствуют геометрии зданий и сооружений, находящихся в этой зоне. Для обеспечения сходимости результатов на расчетной области задается неравномерная пространственная сетка, которая сгущается вблизи поверхности препятствия и внешних границ. Размеры и положения препятствий подбирались для наилучшего совпадения с условиями опубликованных экспериментов. Результат моделирования величины скорости и направления воздушного потока в целом обнаруживают хорошее совпадение с данными экспериментов в аэродинамических трубах в зонах перед препятствием, над ним, а также в его аэродинамической тени. Достоверно воспроизводятся характерные зоны ускоренного течения, завихрений и обратного течения. Расхождения наблюдаются только в локальных областях сильной турбулентности в аэродинамической тени препятствия вблизи поверхности земли. Все это указывает на возможность полноценного моделирования распространения выбросов АЭС с учетом особенностей рельефа площадки конкретной станции и ее основных сооружений с целью уточнения дозовой нагрузки на персонал и население.

Ключевые слова: газоаэрозольные выбросы АЭС, моделирование турбулентной диффузии, ANSYS FLUENT

DOI: 10.1134/S2304487X1906004X

ВВЕДЕНИЕ

Распространение газоаэрозольных выбросов АЭС определяется, в первую очередь, направлением и скоростью ветра. Поперечное по отношению к ветру рассеивание выбрасываемых продуктов связано главным образом с естественными флуктуациями направления ветра, турбулентным перемешиванием воздушных масс, обусловленным состоянием атмосферы (восходящими потоками прогретого воздуха), их собственной вязкостью и трением о подстилающую поверхность. При распространении выброса в условиях сложного рельефа местности (холмы, овраги и т.п.), а также при наличии зданий и сооружений появляется дополнительный источник турбулентности, вызванный обтеканием воздуха этих препятствий. В этом случае трудно ожидать, что концентрацию радиоактивных веществ в воздухе может быть адекватно оценена на основе простых Гауссовых моделей, рекомендованных МАГАТЭ [1].

Среди различных методов исследования воздушного потока в атмосфере, таких, как эксперименты в аэродинамических трубах и натурные измерения на местности, широко используется вычислительная гидродинамика (ВГ) [2–5], которая зарекомендовала себя надежным и экономически эффективным средством моделирования задач турбулентного течения, способным обнаруживать характерные особенности турбулентного обтекания препятствий: аэродинамические тени, зоны разрыва и вихревые дорожки [6].

В настоящей работе средствами пакета ANSYS FLUENT [7] проведено моделирование обтекания воздушным потоком ряда типичных препятствий (трехмерные куб [8] и полусфера [9, 10], а также двумерный холм [11, 12]), которые формируют возможный рельеф зоны распространения выбросов АЭС, а также примерно соответствуют геометрии зданий и сооружений, находящихся в этой зоне. Форма и размеры препятствий были выбраны, исходя из имеющихся публикаций по экспериментам в аэродинамических трубах [13–

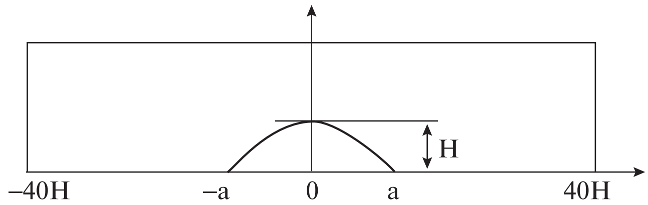

Рис. 1. Схемы расчетной области для препятствия в виде двухмерного холма.

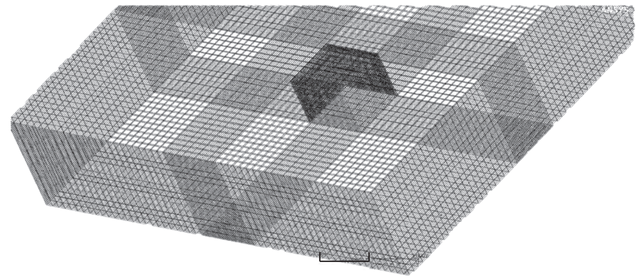

Рис. 2. Трехмерная гексаэдрическая расчетная сетка для кубического препятствия.

15], что позволило сравнить результаты численного моделирования с данными, полученными в прямых измерениях, и тем самым определить степень надежности используемой расчетной модели. Фактическая цель настоящей работы – убедиться в возможности адекватного моделирования распространения газоаэрозольных выбросов в условиях сложного рельефа, что дает возможность проводить для АЭС, находящихся в соответствующей местности, расчеты реальной деформации полей концентрации радионуклидов в приповерхностном слое воздуха.

ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ И РАСЧЕТНАЯ ОБЛАСТЬ

В качестве расчетной модели используются осредненные по Рейнольдсу уравнения Навье–Стокса (RANS) в рамках стандартной (k–ε)-модели турбулентности [16, 17]. Последняя широко и успешно применяется для задач распространения примесей в атмосфере [18, 19]. Ключевыми параметрами модели являются кинетическая энергия турбулентности k и скорость диссипации энергии турбулентности ε, которые в настоящей работе задаются через скорость трения u* в виде:

$$k = \frac{u^{*2}}{\sqrt{C_\mu}},$$

$$\varepsilon = \frac{u^{*3}}{ky},$$

где $C_\mu = 0.09$ – безразмерная эмпирическая константа, а y – вертикальная координата.

Расчетная область определяется типом рассматриваемого препятствия.

Препятствие в форме двумерного холма (рис. 1) параметрически задается в виде

$$x = \frac{1}{2}\xi\left[1 + \frac{a^2}{\xi^2 + m^2(a^2 - \xi^2)}\right], \tag{1}$$

$$y = \frac{1}{2}m\sqrt{a^2 - \xi^2}\left[1 - \frac{a^2}{\xi^2 + m^2(a^2 - \xi^2)}\right], \tag{2}$$

где x – координата вдоль направления ветра, y – вертикальная координата.

Размер подошвы холма равен $2a$. Входящий в формулы (1–2) параметр ξ изменяется в пределах $|\xi| \le a$. Величина m определяется через средний уклон холма $n = H/a$ следующим образом: $m = n + \sqrt{n^2 + 1}$. В настоящих расчетах высота холма принимается равной $H = 0.117$ м, а угол среднего уклона – 26°.

Задачи обтекания трехмерных препятствий в виде полусферы и куба рассмотрены на прямоугольных областях, размеры которых и положения препятствий относительно плоскости входа показаны в табл. 1.

Для обеспечения сходимости результатов на расчетной области задается неравномерная пространственная сетка, которая сгущается вблизи поверхности препятствия и внешних границ. На рис. 2 приведен пример такой гексаэдрической сетки для кубического препятствия.

Закон изменения входной скорости ветра с высотой $u(y)$ для разных препятствий задавался по-разному для обеспечения сравнимости с экспериментальными данными.

Таблица 1. Размеры и положения препятствий в единицах высоты препятствия H

Препятствие	Вертикальный по Z	Продольный, по X	Поперечный, по Y	X-расстояние центра препятствия от входа
Холм	13.7	80	–	40
Полусфера	7.6	26.4	7.6	4.4
Куб	2	10	7	3.5

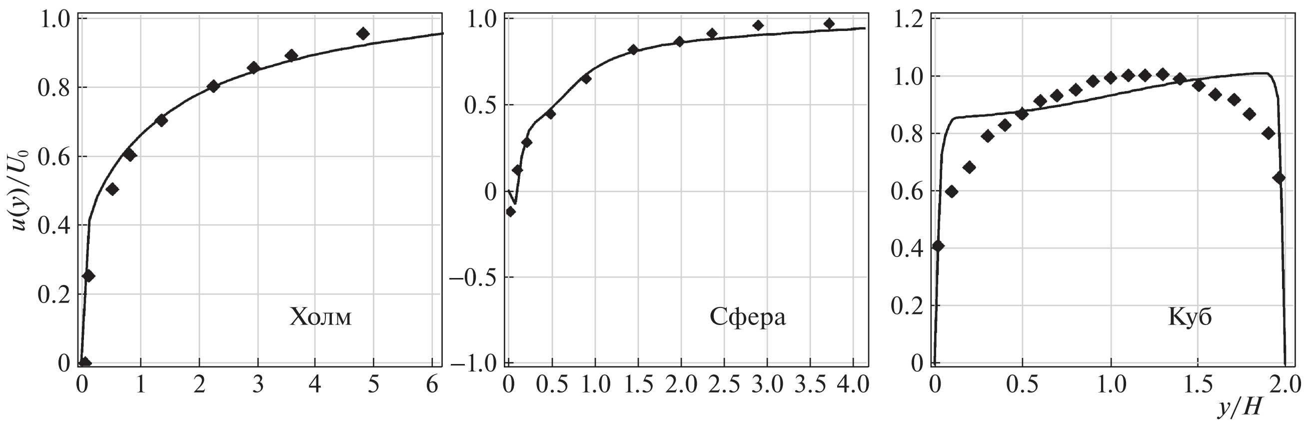

Рис. 3. Вертикальные профили продольной компоненты скорости потока перед препятствиями. Сплошная линия – расчет, ромбики – экспериментальные данные [13–15].

Для полусферы профиль скорости ветра на входе определялся степенной функцией, аналогичной используемой в работах [15].

$$\frac{u}{U_0} = \left(\frac{y}{H}\right)^n, \tag{3}$$

где $n = 0.135$, а U_0 соответствует скорости ветра на высоте препятствия H.

Для двухмерного холма, следуя рекомендациям работы [20], использован логарифмический профиль скорости, который близок к обнаруживаемому при экспериментах в аэродинамических трубах

$$u(y) = \frac{u^*}{K}\left[\ln\left(\frac{y + y_0}{y_0}\right)\right], \tag{4}$$

где u^* – скорость трения; y_0 – высота шероховатости в м, K – постоянная Кармана, значение которой принималось равным 0.41. При этом значение скорости свободного потока $U_0 = 4$ м/с достигалось на верхней плоскости расчетной области.

Для расчетов обтекания куба скорость ветра на входе принималась постоянной с высотой: $u(y) = U_0$, где $U_0 = 0.6$ м/с.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Фактическими результатами настоящей работы явились расчеты величины скорости и направления ветра вблизи препятствий различной формы в сравнении с экспериментальными данными в аэродинамических трубах [13–15]. На рисунках 3–5 в качестве иллюстрации приведены вертикальные профили продольной (вдоль оси X) компоненты скорости потока перед препятствием, над и за ним на оси симметрии препятствия ($y = 0$) для x-координат, приведенных в табл. 2. Расчетная скорость на определенной высоте $u(y)$ приведена к величине скорости входного потока U_0. Начало оси X совпадает с центром препятствия.

Перед препятствием на расстояниях от него порядка высоты самого препятствия искажение потока незначительно (рис. 3). Отклонение приведенной скорости от 1 связано с влиянием верхней и нижней границы расчетной области. Для куба граничные условия на обеих плоскостях задают нулевую скорость (условие "стена"). При этом высота рассматриваемой области только в 2 раза превышает высоту препятствия. Для него, тем не менее, торможение потока в зоне $y < H$ заметно: распределение рассчитанных и измеренных скоростей асимметрично относительно середины $y = H$. При расчетах обтекания холма и полусферы на верхней границе заданы условия симметрии, в силу чего торможение на ней отсутствует. Для полусферы расчеты и эксперименты у самой земли обнаруживают слабое обратное течение $u(y) < 0$, вызванное завихрением в нижней части препятствия. В целом совпадение расчетных и экспериментальных данных можно считать вполне удовлетворительным.

Профили продольной компоненты скорости ветра, полученные непосредственно над центром препятствием, приведены на рис. 4. Они также демонстрируют хорошее согласие расчетов и экс-

Таблица 2. Координаты определения профилей скорости потока перед, над и за препятствием в единицах высоты препятствия H

Препятствие	Перед	Над	За
Холм	−0.5	0	0.5
Полусфера	−1.17	0	1.17
Куб	−1.5	0	1.5

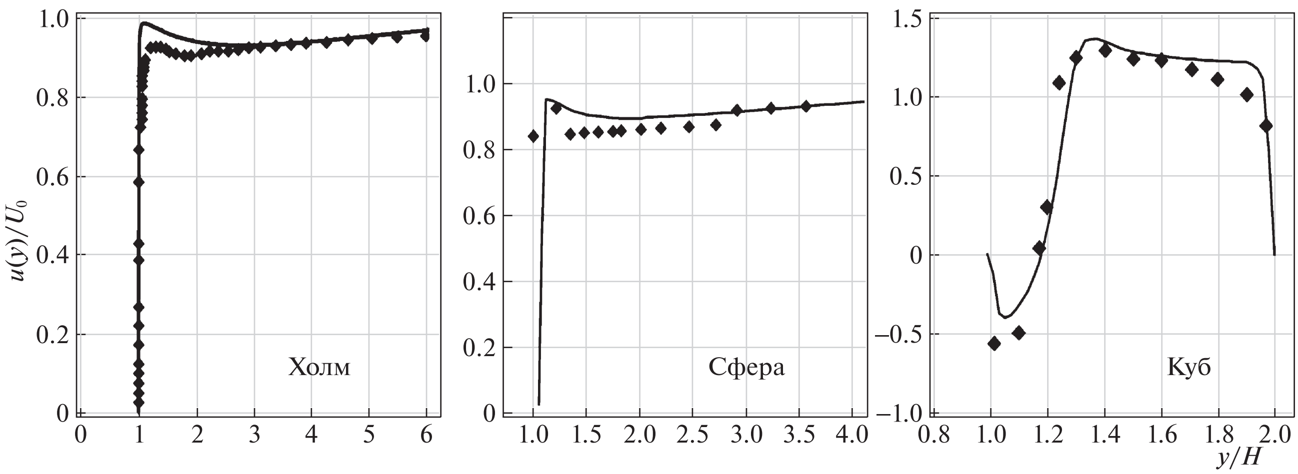

Рис. 4. Вертикальные профили продольной компоненты скорости потока над препятствиями. Сплошная линия – расчет, ромбики – экспериментальные данные [13–15].

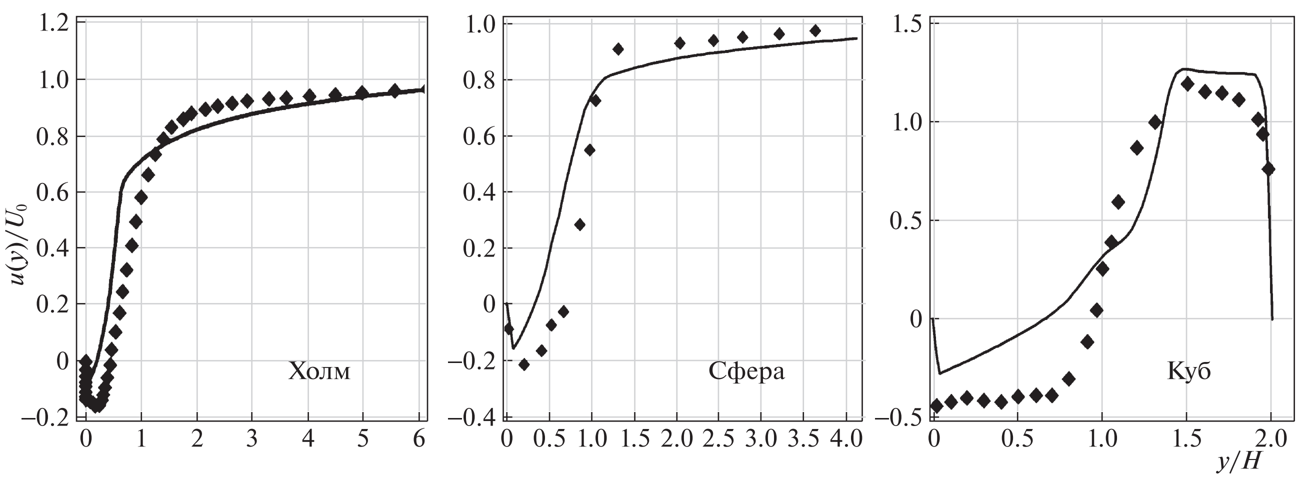

Рис. 5. Вертикальные профили продольной компоненты скорости потока за препятствиями. Сплошная линия – расчет, ромбики – экспериментальные данные [13–15].

периментов. Кроме того, на верхней грани наименее обтекаемого препятствия (куба) и расчеты, и эксперименты показывают значительную зону завихрений и обратного течения. Выше же этой зоны наблюдается ускоренное течение.

Распределение скоростей за препятствием, и особенно в его аэродинамической тени (рис. 4), характеризуется замедлением и закручиванием потока в обратном направлении – тем большим, чем менее обтекаемым оказывается препятствие. Наиболее сильно данный эффект проявляется для куба. В целом в зоне обратного потока моделирование дает завышение скорости по сравнению с экспериментом. Максимальные различия в абсолютных величинах скорости наблюдаются в зоне наибольшей турбулентности сразу за препятствием непосредственно у поверхности земли. Такая переоценка, скорее всего, обусловлена допущением об изотопной вязкости в числовой модели, которое не является точным, особенно вблизи земной поверхности, где интенсивность турбулентности значительно пространственно варьируется. К сожалению, использованные нами источники [13–15] не содержат сведений о неопределенностях экспериментальных данных.

Качественные особенности обтекания потоком кубического препятствия хорошо видны на рис. 6, где приведено распределение векторов скорости потока. Вертикальные линии на нем соответствуют x-координатам, в которых рассчитывались профили скорости, показанные на рис. 3–5.

Куб, имитирующий здания и сооружения самой АЭС, является наиболее сложным для обтекания препятствием. Протяженность зоны турбулентности с подветренной стороны (рис. 6) явля-

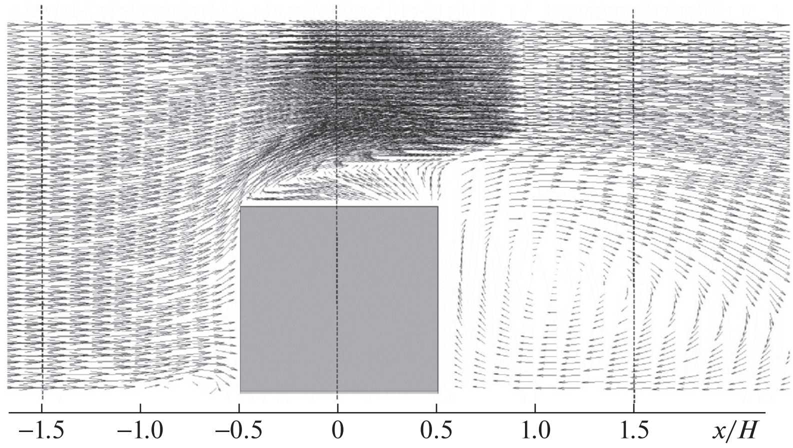

Рис. 6. Поле скоростей потока при обтекании кубического препятствия.

ется максимальной по сравнению с холмом и полушарием. В отличие от последних, для куба характерно также образование турбулентной зоны с отрыванием потока над верхней плоскостью крыши, а также вдоль вертикальных боковых плоскостей, где образуется пара встречно вращающихся вихрей в горизонтальной плоскости. Отрыв потока начинается перед строением и далее развивается с его фронтовой верхней грани и на боковых стенках. В силу этих особенностей данная задача представляет особый интерес для тестирования современных расчетных алгоритмов вычислительной гидродинамики.

ВЫВОДЫ

Сравнение результатов моделирования обтекания ветром типичных неоднородностей рельефа с прямыми экспериментами в аэродинамических трубах позволяют заключить, что модели на основе RANS-уравнений, несмотря на умеренные вычислительные затраты, дают в целом удовлетворительное совпадение с экспериментом. Исключением являются локальные области сильной турбулентности в аэродинамической тени препятствия вблизи поверхности земли, а также непосредственно над горизонтальными крышами зданий.

Приведенное сравнение дает основание считать, что моделирование распространения газоаэрозольных выбросов АЭС в условиях неоднородного рельефа и наличия зданий и сооружений на основе RANS-уравнений средствами пакета ANSYS FLUENT способно давать адекватные результаты для расчета дозовых нагрузок персонала и локально проживающего населения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Серия изданий по безопасности № 50-SG-S3. Руководства МАГАТЭ по безопасности. Вена, 1980.
2. *Leelőssy Á., Lagzi I., Kovacs A., Meszaros R.* A review of numerical models to predict the atmospheric dispersion of radionuclides. Journal of Environmental Radioactivity. 2018. № 182. P. 20–33.
3. *Yoshihide T., Akashi M., Ryuichiro Y., Hiroto K., Tsuyoshi N., Masaru Yoshikawa T.* AIJ guidelines for practical applications of CFD to pedestrian wind environment around buildings. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics 2008. № 96. P. 1749–1761.
4. *Gorle C., Beeck J.V., Rambaud P., Tendeloo G. V.* CFD modelling of small particle dispersion: The influence of the turbulence kinetic energy in the atmospheric boundary layer. Atmospheric Environment. 2009. № 43. P. 673–681.
5. *Ai Z.T., Mak C.M.* CFD simulation of flow and dispersion around an isolated building: Effect of inhomogeneous ABL and near-wall treatment. Atmospheric Environment. 2013. № 77. P. 568–578.
6. *Ступин А.Б., Оверко В.С.* Влияние неоднородности рельефа на рассеивание выбросов в атмосфере. ДоНТУ. 2006. http://ea.donntu.org/handle/123456789/6268.
7. ANSYS Fluent Theory Guide, ANSYS, Inc., 275 Technology Drive Canonsburg, PA 15317, November 2013.
8. *Yu Y., Kwok K.C.S., Liu X.P., Zhang Y.* Air pollutant dispersion around high-rise buildings under di@erent angles of wind incidence. Journal of Wind Engineering & Industrial Aerodynamics.2017. № 167. P. 51–61.
9. *Zhenqing L., Shuyang C., Heping L., Takeshi I.* Large-Eddy Simulations of the Flow Over an Isolated Three-Dimensional Hill. Boundary-Layer Meteorology. 2019. № 170. P. 415–441.
10. *Takeshi I., Kazuki H., Susumu O.* A wind tunnel study of turbulent flow over a three-dimensional steep hill. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. 1999. № 83. P. 95–107.
11. *Ferreira A.D., Silva M.C.G., Viegas D.X., Lopes A.M.G.* Wind tunnel simulation of the flow around two dimen-

sional hills. Journal of Wind energy and Industrial Aerodynamics. 1991. № 38. P. 109–122.

12. *Kim H.G., Lee C.M., Lim H.C., Kyong N.H.* An experimental and numerical study on the flow over two dimensional hills. Journal of Wind energy and Industrial Aerodynamics. 1997. № 66. P. 7–33.

13. *Trombetti F., Martano P., Tampieri F.* 'Data Sets for Studies of Flow and Dispersion in Complex Terrain: The "RUSHIL" Wind Tunnel Experiment (Flow Data)', Technical Report No 4, FISBAT-RT-1991/1.

14. *Martinuzzi R., Tropea C.* The flow around surface-mounted, prismatic obstacles in a fully developed channel flow. Journal of Fluids Engineering. 1993. № 115. P. 85–92.

15. *Tavakol M.M., Yaghoubi M., Masoudi Motlagh M.* Air flow aerodynamic on a wall-mounted hemisphere for various turbulent boundary layers. Experimental Thermal and Fluid Science. 2010. № 34. P. 538–553.

16. *Juretic F., Hrvoje H.*, Computational modeling of the neutrally stratified atmospheric boundary layer flow using the standard *k–e* turbulence model. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. 2013. № 115. P. 112–120.

17. *Richards P.J., Norris S.E.* Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models revisited. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. 2011. № 99. P. 257–266.

18. *Xing J., Liu Z.Y., Huang P., Feng C.G., Zhou Y., Zhang D.P., Wang F.* Experimental and numerical study of the dispersion of carbon dioxide plume. Journal of Hazardous Materials. 2013. № 256. P. 40–48.

19. *Kiša M., Jelemenský L.* CFD Dispersion Modelling for Emergency Preparedness. Journal of Loss Prevention in the Process Industries. 2009. № 22 (1). P. 97–104.

20. *Richards P.J., Hoxey R.P.* Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models using the *k*ε-model. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. 1993. № 46. P. 145–153.

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI", 2019, vol. 8, no. 6, pp. 546–552

The Application of Computational Fluid Dynamics to the Diffusion of Gas–Aerosol Emissions in Conditions of Complex Terrain

M. Mehdi[a] and M. P. Panin[a,#]

[a] *National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia*

[#]*e-mail: MPPanin@mephi.ru*

Received October 7, 2019; revised October 14, 2019; accepted October 15, 2019

Abstract—This paper presents the simulation of airflow around a set of typical obstructions (three-dimensional cube and hemisphere, as well as a two-dimensional hill) by means of ANSYS FLUENT package within the framework of the standard (k–ε) turbulence model. The obstructions represent the buildings and typical landforms in the area of nuclear power plant emissions. To ensure the convergence of the results, we used a non-uniform spatial grid on the computational domain, which thickened near the obstruction surface and the outer boundaries. The size and position of the obstruction were chosen to best match the conditions of the published experiments. The result of modeling the velocity and direction of the air flow as a whole reveals a good agreement with the experimental data in wind tunnels in the areas in front of the obstacle, above it, as well as in its aerodynamic shadow. Characteristic zones of accelerated flow, vortices and reverse flow are reliably reproduced. The length of the turbulence zone of the leeward side of the cube is the maximum in comparison with the hill and hemisphere. Unlike the latter, the cube also forms a turbulent zone with the separation of the flow over the upper plane of the roof. Differences with experiments are observed only in local areas of strong turbulence in the aerodynamic shadow of an obstacle near the ground surface. All this opens the possibility of a full-fledged simulation of the diffusion of nuclear power plant emissions, taking into account the terrain features of the site of a particular station and its main building in order to refine the personnel and public exposure.

Keywords: NPP atmospheric emissions, CFD modeling, k–ε model, ANSYS FLUENT

DOI: 10.1134/S2304487X1906004X

REFERENCES

1. Seria izdanij po bezopasnosti No. 50-SG-S3. Rukovodstva MAGATE po bezopasnosti, 1980 [Safety Series No. 50-SG-S3. IAEA Safety Guides. Vienna, 1980].

2. Leelőssy Á., Lagzi I., Kovacs A., Meszaros R. A review of numerical models to predict the atmospheric dispersion of radionuclides. Journal of Environmental Radioactivity. 2018, no. 182, pp. 20–33.

3. Yoshihide T., Akashi M., Ryuichiro Y., Hiroto K., Tsuyoshi N., Masaru Yoshikawa T. AIJ guidelines for practical applications of CFD to pedestrian wind environment around buildings. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics 2008, no. 96, pp. 1749–1761.
4. Gorle C., Beeck J.V., Rambaud P., Tendeloo G.V. CFD modelling of small particle dispersion: The influence of the turbulence kinetic energy in the atmospheric boundary layer. Atmospheric Environment. 2009, no. 43, pp. 673–681.
5. Ai Z.T., Mak C.M. CFD simulation of flow and dispersion around an isolated building: Effect of inhomogeneous ABL and near-wall treatment. Atmospheric Environment.2013, no. 77, pp. 568–578.
6. Stupin A.B., Overko V.S. Vliyaniye neodnorodnosti relyefa na rasseyannoye rasprostraneniye v landshafte. DoNTU. 2006 Available at. http://ea.donntu.org/handle/123456789/6268. [Stupin A.B., Overko V.S. Influence of the form of a relief on distributions of emissions in an atmosphere. DONNTU. 2006. http://ea.donntu.org/handle/123456789/6268] (in Russian).
7. ANSYS Fluent Theory Guide, ANSYS, Inc., 275 Technology Drive Canonsburg, PA 15317, November 2013.
8. Yu Y., Kwok K.C.S., Liu X.P., Zhang Y. Air pollutant dispersion around high-rise buildings under different angles of wind incidence. Journal of Wind Engineering & Industrial Aerodynamics. 2017, no. 167, pp. 51–61.
9. Zhenqing L., Shuyang C., Heping L., Takeshi I. Large-Eddy Simulations of the Flow Over an Isolated Three-Dimensional Hill. Boundary-Layer Meteorology. 2019, no. 170, pp. 415–441.
10. Takeshi I., Kazuki H., Susumu O. A wind tunnel study of turbulent flow over a three-dimensional steep hill. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. 1999, no. 83, pp. 95–107.
11. Ferreira A.D., Silva M.C.G., Viegas D.X., Lopes A.M.G. Wind tunnel simulation of the flow around two dimensional hills. Journal of Wind energy and Industrial Aerodynamics. 1991, no. 38, pp. 109–122.
12. Kim H.G., Lee C.M., Lim H.C., Kyong N.H. An experimental and numerical study on the flow over two dimensional hills. Journal of Wind energy and Industrial Aerodynamics. 1997, no. 66, pp. 7–33.
13. Trombetti F., Martano P., Tampieri F. 'Data Sets for Studies of Flow and Dispersion in Complex Terrain: The "RUSHIL" Wind Tunnel Experiment (Flow Data)', Technical Report No. 4, FISBAT-RT-1991/1.
14. Martinuzzi R., Tropea C. The flow around surface-mounted, prismatic obstacles in a fully developed channel flow. Journal of Fluids Engineering. 1993, no. 115, pp. 85–92.
15. Tavakol M.M., Yaghoubi M., Masoudi Motlagh M. Air flow aerodynamic on a wall-mounted hemisphere for various turbulent boundary layers. Experimental Thermal and Fluid Science. 2010, no. 34, pp. 538–553.
16. Juretic F., Hrvoje H., Computational modeling of the neutrally stratified atmospheric boundary layer flow using the standard k–e turbulence model.Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. 2013, no. 115, pp. 112–120.
17. Richards P.J., Norris S.E. Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models revisited. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. 2011, no. 99, pp. 257–266.
18. Xing J., Liu Z.Y., Huang P., Feng C.G., Zhou Y., Zhang D.P., Wang F. Experimental and numerical study of the dispersion of carbon dioxide plume. Journal of Hazardous Materials. 2013, no 256, pp. 40–48.
19. Kiša M., Jelemenský L. CFD Dispersion Modelling for Emergency Preparedness. Journal of Loss Prevention in the Process Industries. 2009, no. 22 (1), pp. 97–104.
20. Richards P. J., Hoxey R.P. Appropriate boundary conditions for computational wind engineering models using the $k\varepsilon$-model. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. 1993, no. 46, pp. 145–153.

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА “МИФИ”, 2019, том 8, № 6, с. 553–568

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

УДК 590.17:620.162

МЕТОДЫ ВИРТУАЛИЗАЦИИ В ПЕРСПЕКТИВНЫХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

© 2019 г. А. А. Моисеев*

НПП “Технос-РМ”, Мытищи, 141002, Россия

**e-mail: slow.coach@yandex.ru*

Поступила в редакцию 23.04.2019 г.
После доработки 31.08.2019 г.
Принята к публикации 17.09.2019 г.

Квалификационные испытания интерпретируются как частный случай полунатурного эксперимента, в котором лабораторная установка играет роль физической модели системы, включающей исследуемый объект. В этих условиях виртуализация представляет собой переход от физических к математическим моделям системы и объекта и допускает виртуальную квалификацию, т.е. реализацию квалификационных испытаний в виде численного эксперимента. Виртуализация позволяет, в частности, осуществить экстраполяцию лабораторных результатов на штатные условия эксплуатации, а также обратный пересчет этих условий в адекватные параметры квалификационного эксперимента. Эффективность виртуализации продемонстрирована на примерах оптимизации математических моделей, совершенствования квалификационных экспериментов и прогнозирования их результатов, а также использования критериальных моделей для адекватной параметризации квалификационных экспериментов по эксплуатационным характеристикам. Для проведения виртуальной квалификации синтезированы модели двигателя внутреннего сгорания, предназначенные для исследования влияния химмотологических и трибологических факторов на динамику двигателя и его кпд. Они основывались на соотношении для баланса мощности двигателя и отличаются методом имитации давления в цилиндре. Учет трения в рамках моделей базировался на аппроксимации кривой Герси–Штрибека и ее использовании для расчета коэффициента смешанного трения в зависимости от числа Зоммерфельда. На основе анализа противоизносных свойств смазывающего топлива построена критериальная модель объемного износа, предназначенная для прогнозирования величины последнего при заданных условиях. Синтезированную таким образом критериальную модель было предложено использовать для прогнозирования износа в экстремальных условиях и формирования соответствующих квалификационных нормативов. Для аппроксимации плотности нефтепродуктов было предложено использовать модельно-ориентированную идентификацию. С этой целью построен модифицированный алгоритм оценки плотности углеводородов, базирующийся на использовании закона соответственных состояний. В отличие от традиционного алгоритма, основанного на использовании таблиц корреляций, в модифицированном алгоритме используется представление плотности в виде степенной функции приведенных температуры и давления. Показано, что для легких алканов модифицированный алгоритм обеспечивает лучшую точность в сравнении с традиционным.

Ключевые слова: квалификационные испытания, полунатурный эксперимент, численный эксперимент, физическая модель, виртуализация, виртуальная квалификация, критериальная модель, кривая Герси–Штрибека, число Зоммерфельда, противоизносные свойства, квалификационные нормативы, идентификация, алканы, закон соответственных состояний, фактор сжимаемости

DOI: 10.1134/S2304487X19060051

Обычной целью математического моделирования технологических процессов является прогнозирование протекания этих процессов в различных условиях, в том числе – не охватываемых натурным экспериментом. К подобной модели обычно предъявляются два основных требования – универсальности и адекватности. Универсальность позволяет использовать модель в широком диапазоне внешних условий, в том числе – в составе моделей более высокого уровня. Адекватность обеспечивает соответствие модели конкретным условиям проведения эксперимента. Указанные требования определяют типичную структуру модели. В основу последней закладывается в качестве каркаса базовая модель, описывающая процесс в общих чертах. Адекватность при этом обеспечивается в ходе параметризации модели по результатам сравнения с калибровоч-

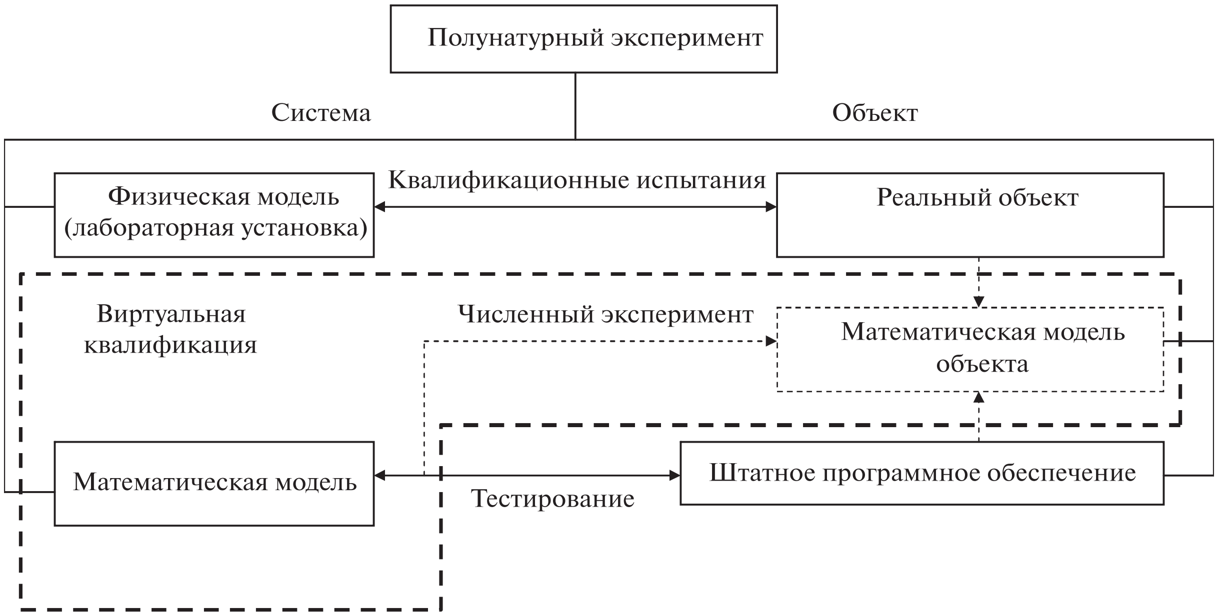

Рис. 1. Виртуальная квалификация.

ными экспериментами. Это обуславливает основные требования к интерфейсу модели — наряду со входами, определяющими условия проведения численного эксперимента, она включает предварительно настраиваемые калибровочные параметры. Полнота и непротиворечивость системы этих параметров определяют адекватность модели и обеспечиваются в ходе ее идентификации.

Являясь прикладной дисциплиной, химмотология предполагает существенный примат экспериментальных методов исследования, реализуемых в форме квалификационных испытаний объекта. Вместе с тем, как указывалось выше, построение базовой модели охватывающих системы или процесса осуществляется в рамках теоретических, главным образом физико-химических исследований. В свою очередь адекватная настройка этих моделей осуществляется по результатам квалификационных испытаний. Главной особенностью последних является то, что их основным методом является лабораторное исследование объекта, который в принципе ничем не будет отличаться от эксплуатируемого [1]. Лабораторную установку в этих условиях можно рассматривать как физическую модель системы, охватывающей объект. В этом смысле квалификационные испытания являются частным случаем более широкого понятия полунатурного эксперимента, в рамках которого охватывающая модель или ее часть может быть реализована как математическая. В этих условиях адекватную математическую модель системы, охватывающей объект, можно интерпретировать как некую виртуальную реальность, а численный эксперимент в составе полунатурного — как виртуальную квалификацию. При этом натурные эксперименты, проводимые в рамках обычных квалификационных испытаний, могут выступать как средство идентификации создаваемых математических моделей [2].

Место виртуальной квалификации в составе полунатурного эксперимента отображено на рис. 1. Математическая модель объекта строится на основе его описания и может взаимодействовать со штатным программным обеспечением в случае управляемости объекта. В свою очередь, математическая модель охватывающей системы строится на основе ее описания и может реализовывать функции, не реализуемые физической моделью. Виртуальная квалификация осуществляется в ходе численного эксперимента с математическими моделями объекта и системы. При этом решаются две основные задачи:

• сравнительная идентификация математических моделей в условиях, обеспечиваемых физической моделью — лабораторной установкой;

• предварительная отладка штатного программного обеспечения в случае управляемости объекта.

Примером применения такого общего подхода является моделирование двигателя внутреннего сгорания, отображенное в работах [3, 4]. Первая из них посвящена созданию упрощенной математической модели двигателя внутреннего сгорания, предназначенной для моделирования влияния химмотологических процессов на динамику двигателя, его кпд и смазочную способность используемых масел. Модель позволяет проводить численные эксперименты, воспроизводящие отдельные этапы стендовых испытаний. В перспективе, как предполагается, это позволит заменить проведение однотипных натурных экспериментов их численными аналогами, что обеспечит экономию времени и средств.

Для идентификации модели использовались результаты квалификационных испытаний на установке ИМ-1, проводимых в соответствии с ГОСТ 20303-74. Поэтому считается, что виртуальный двигатель в составе модели нагружен на имитатор асинхронной машины, а потери на трение в двигателе описываются в зависимости от износа цилиндро-поршневой группы и степени ее загрязнения в рамках модели Герси–Штрибека. Эти факторы влияют на коэффициент трения пары поршень–цилиндр, а также на величину зазора между поршнем и стенкой цилиндра и, следовательно, на величину смешанного трения. Упрощенная модель базируется на соотношении баланса мощности и нагрузки двигателя, нагруженного на асинхронную машину в генераторном режиме. В нормализованной форме уравнение баланса имеет вид:

$$T\frac{du}{dt} = \pi\sqrt{u} - \pi_{fr}\sqrt{u} - n_0(\sqrt{u}-1)\max(1,\sqrt{u}), \qquad (1)$$

где $u = \left(\dfrac{\omega}{\omega_0}\right)^2$ – нормированный квадрат частоты,

$\pi = \dfrac{p}{p_0}$ – нормированное давление в цилиндре,

$\pi_{fr} = \dfrac{p_{fr}}{p_0}$ – нормированное напряжение трения,

$T = \dfrac{J\omega_0^2}{2N_0}$ – характерное время разгона,

где J – момент инерции кривошипа;

ω, ω_0 – текущая и номинальная циклическая частота;

p – давление в цилиндре, Па;

p_{fr} – напряжение трения, Па.

Общая схема модели приведена на рис. 2. По существу, это схема реализации решения уравнения (1) с возможностью варьирования мощности двигателя и синхронной частоты. Основной особенностью модели является то, что для описания динамики давления в цилиндре используется индикаторная диаграмма двигателя. Последняя представляет собой зависимость давления в двигателе от смещения поршня на различных тактах двигателя. Этим тактам соответствуют различные диапазоны угла поворота кривошипа (коленчатого вала), который является дополнительным входом индикаторной диаграммы. В модели индикаторная диаграмма реализована в виде линейных интерполяторов давления в зависимости от положения поршня, соответствующих различным тактам двигателя и выбираемых по величине угла поворота кривошипа. Как правило, индикаторная диаграмма соответствует номинальной мощности двигателя. Для учета возможной неноминальности используется регулируемый мультипликативный фактор g, имеющий смысл степени открытия виртуального дросселя подачи. Этот фактор формируется имитатором подачи, основой которого является встроенный PID регулятор мощности. Нормированная нагрузка n_l двигателя связана с номинальной n_0 соотношением $n_l = n_0\max(1,\sqrt{u})(\sqrt{u}-1)$. В свою очередь номинальная нагрузка формируется имитатором динамического тормоза, основой которого является регулятор синхронной частоты. Нормированная мощность потерь определяется нормированным моментом трения π_{fr}.

Дальнейшее развитие упрощенной модели осуществлялось в направлении совершенствования имитации процессов в двигателе. В работе [4] исследовалась многофункциональная модель двигателя внутреннего сгорания, объединяющая субмодели основных подсистем двигателя. К их числу относятся:

– модель внутреннего смесеобразования, определяющая характеристики горючей смеси;

– модели тепловыделения и газообмена в цилиндре, имитирующие тактовые процессы в двигателе;

– модель кривошипно-шатунного механизма, связывающая процессы в двигателе с внешними воздействиями.

Общая схема модели приведена на рис. 3. Ее входами являются положения воздушного дросселя, топливного дозатора, а также передаточное число редуктора, связывающего ходовую ось с коленчатым валом. Эти входы естественным образом интерпретируют органы управления двигателем. Модель также может включать вспомогательные субмодели, предназначенные, в частности, для имитации состава выхлопа и охлаждения двигателя. Первая из них базируется на упрощении системы кинетических уравнений цепного процесса в квазистационарном приближении. Она позволяет имитировать динамику состава выхлопа в виде временных зависимостей молярных долей его компонент. Разработанная методика может быть использована при прогнозировании состава выхлопа для различных цепных процессов с установленной последовательностью сопряженных реакций. Модель охлаждения ос-

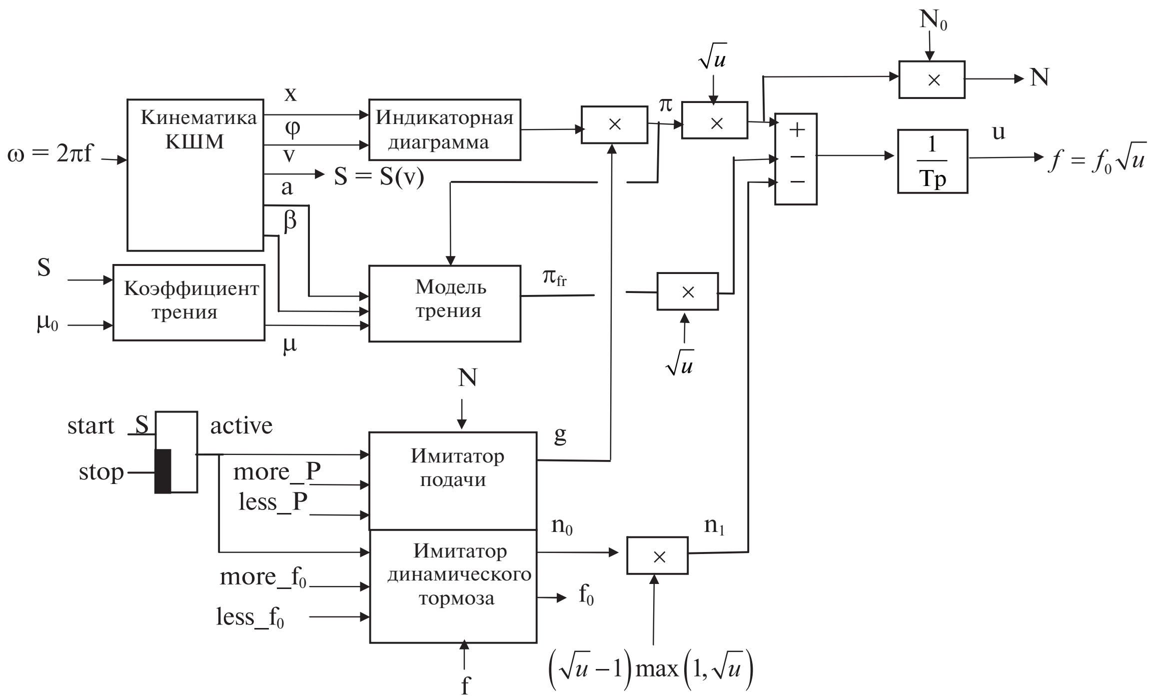

Рис. 2. Общая схема упрощенной модели двигателя.

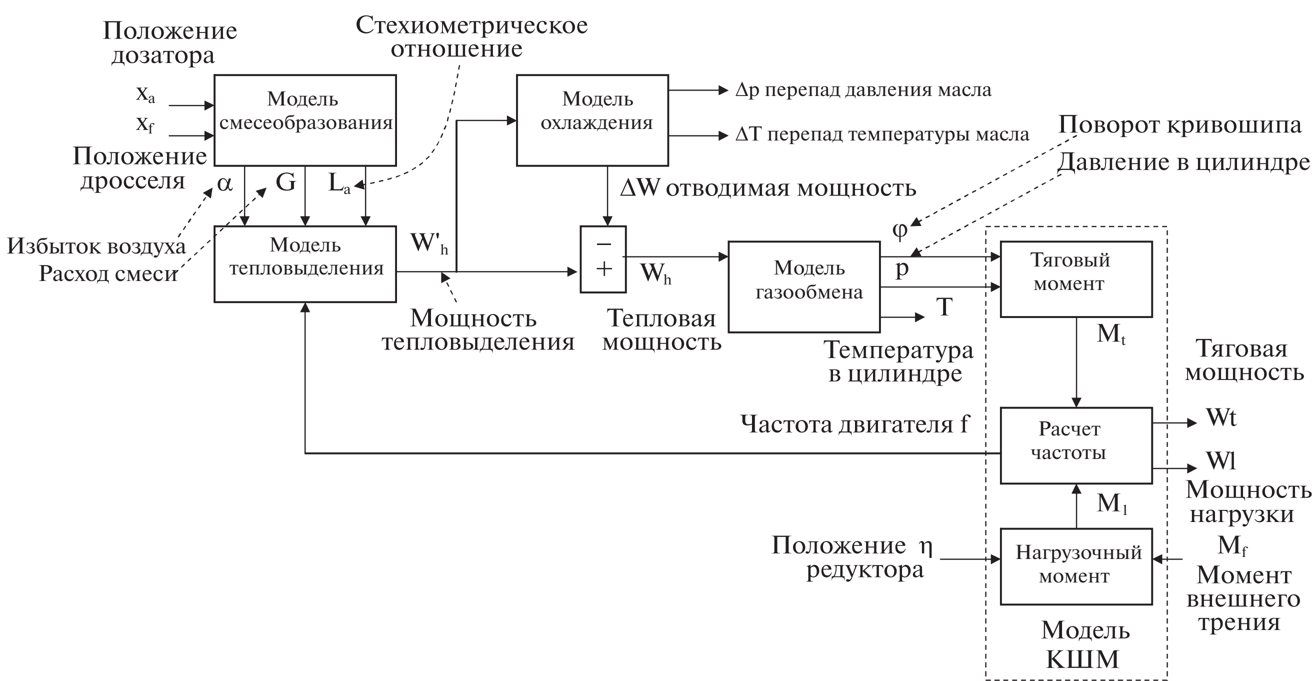

Рис. 3. Схема многофункциональной модели.

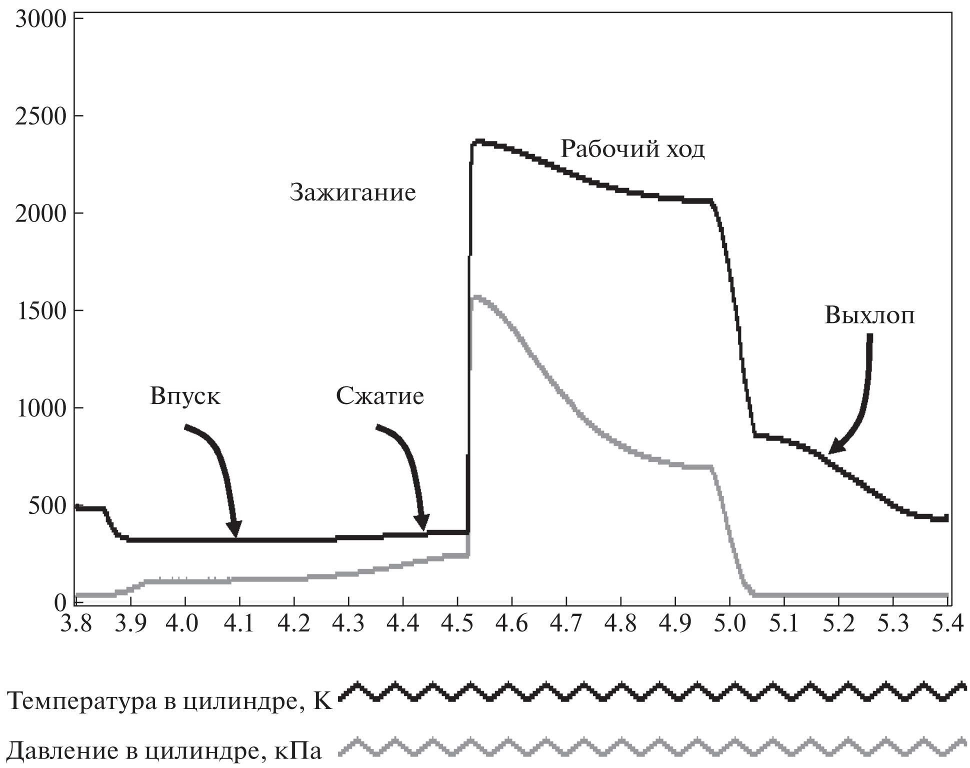

Рис. 4. Цикл без самовоспламенения.

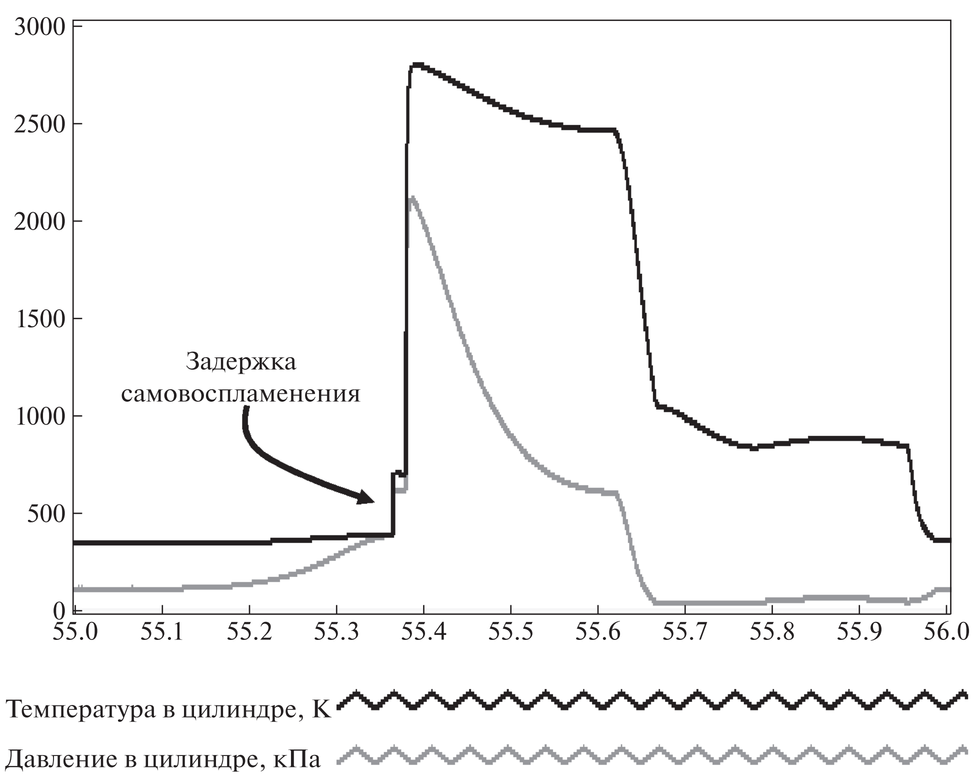

Рис. 5. Цикл с самовоспламенением.

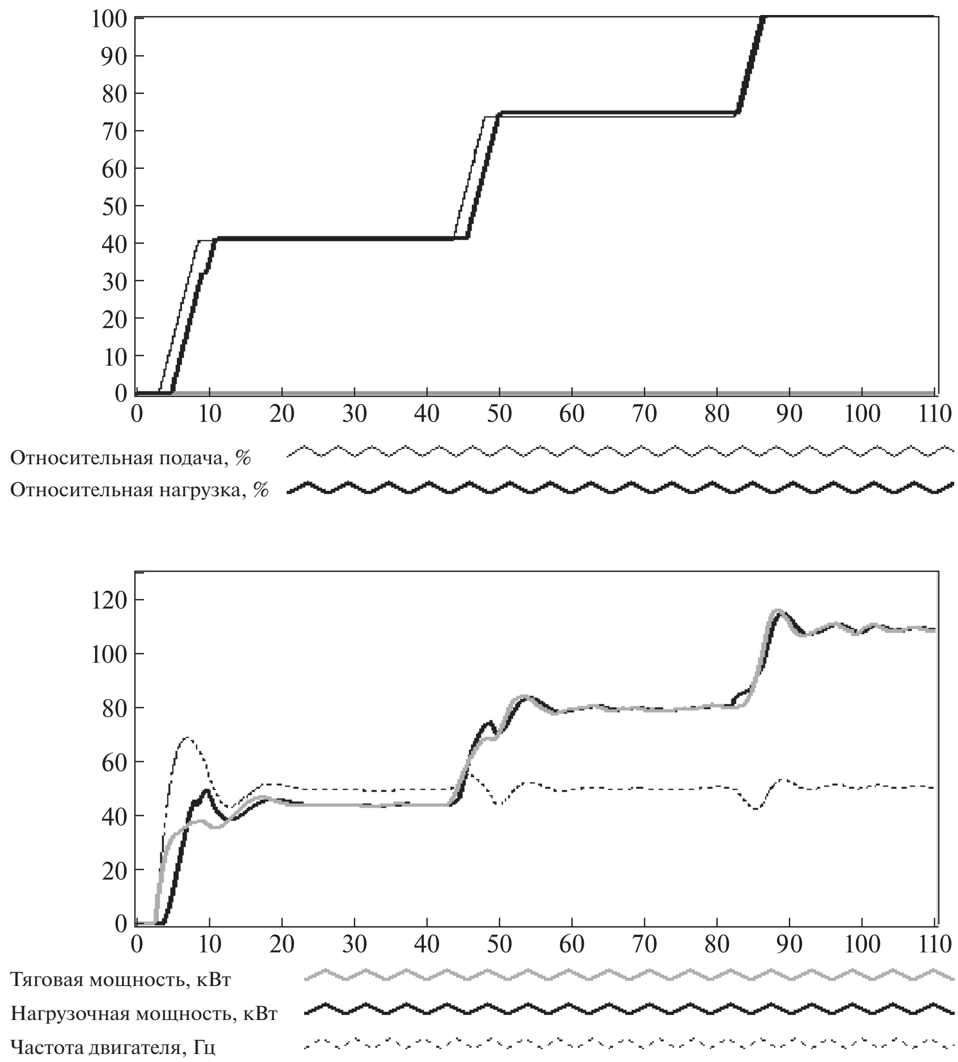

Рис. 6. Ступенчатое нагружение двигателя.

новывается на разработанной методике расчета гидравлических цепей. В этом расчете линейные регуляторы используются как численные решатели нелинейных уравнений Кирхгофа для баланса расходов и перепадов давления. Данная методика менее трудоемка, чем традиционно используемые, и применима при квазистационарных изменениях параметров гидравлической цепи. Двигатель в рамках данной модели интерпретируется как теплообменник.

Имитируемая динамика давления и температуры газа в цилиндре в соответствии с фазами газообмена отображена на рис. 4 для цикла без самовоспламенения и на рис. 5 для цикла с самовоспламенением. Построенная модель использовалась также для имитации основных процессов в двигателе. Результаты симуляции ступенчатого нагружения двигателя приведены на рис. 6. Относительная нагрузка при этом увеличивалась с некоторой временной задержкой относительно подачи. В ходе регулирования имитируемая частота двигателя стабилизировалась на номинальном уровне, а тяговая и нагрузочная мощности выравнивались. Таким образом, был продемонстрирован эффект саморегулирования частоты двигателя при изменении нагрузки.

Результаты принудительного регулирования частоты двигателя отображены на рис. 7. Уставкой регулирования была номинальная частота двигателя, а выходом – величина относительной подачи. В исходном состоянии величина относительной нагрузки была нулевой. После включения регулятора величина уставки по частоте увеличивалась до номинальной частоты. Дополни-

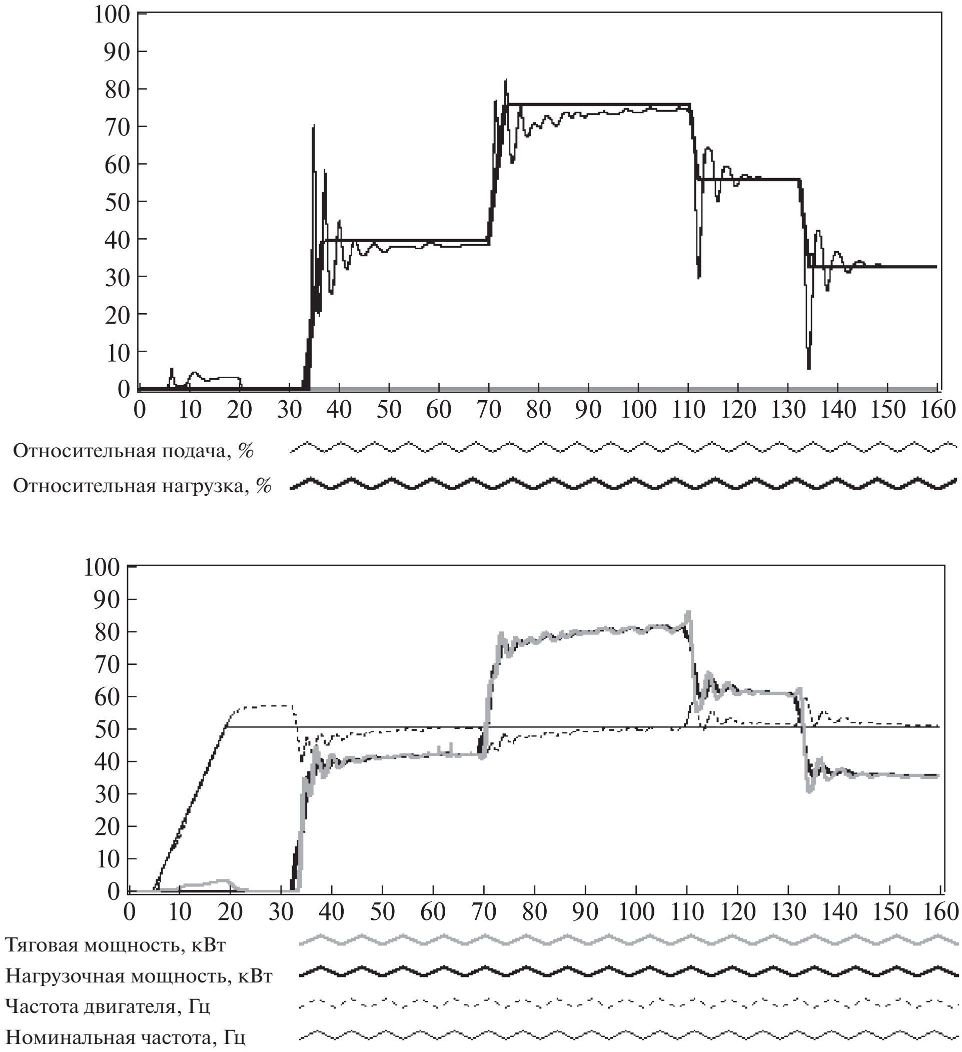

Рис. 7. Регулирование частоты двигателя.

тельное увеличение нагрузки приводило к соответствующему увеличению подачи под действием регулятора. Текущая частота при этом стабилизировалась на номинальном уровне, а тяговая и нагрузочные мощности выравнивались. Качественный анализ имитируемой динамики показывает, что в целом модель адекватно отображает процессы в двигателе и может быть использована для исследования влияния характеристик ГСМ на процессы в цилиндре.

Важным аспектом применения виртуальной квалификации является экстраполяция лабораторных результатов на штатные условия эксплуатации исследуемого объекта. В качестве примера такой экстраполяции можно привести прогнозирование объемного износа головки насосного плунжера с учетом противоизносных свойств смазывающего топлива [5–8].

В качестве критерия подобия между лабораторной установкой и исследуемым плунжером был выбран критерий объемного износа, отображенный на рис. 8. Его физический смысл – отношение импульса износного материала к импульсу силы трения. Критерий включает плотность износного материала, скорость скольжения и нормальное давление во фрикционном контакте, а также длительность износа. Коэффициент граничного трения определяется коэффициентом сухого трения и числом Зоммерфельда. Принималось, что число Зоммерфельда помимо вязкости, скорости скольжения и твердости зависит также от кислотности A смазывающей среды и процентного содержания в ней серы S.

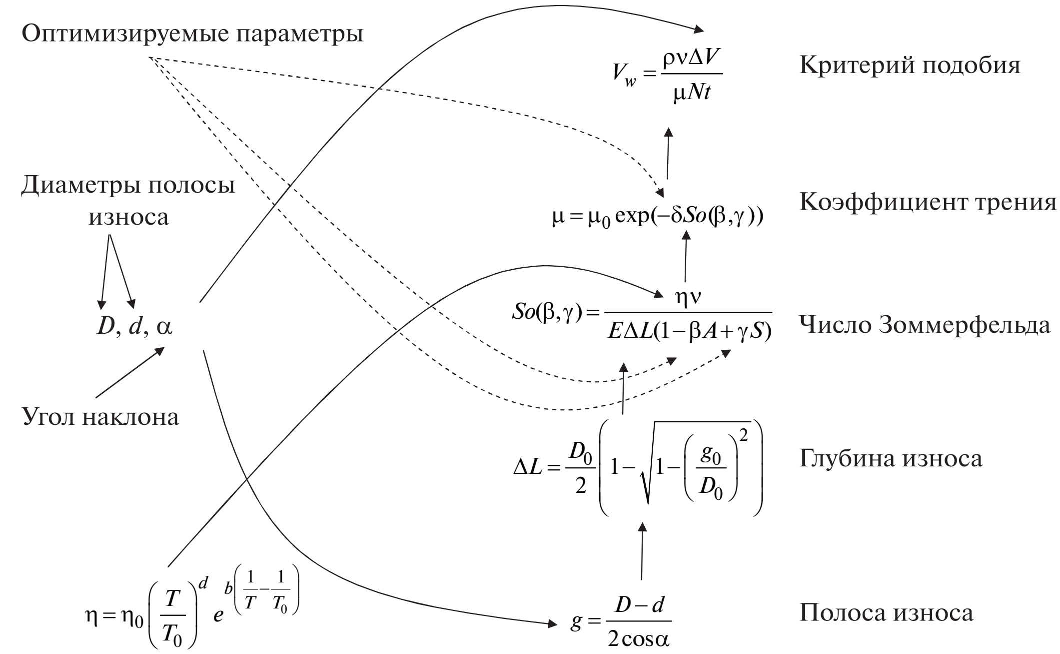

Рис. 8. Критерий объемного износа.

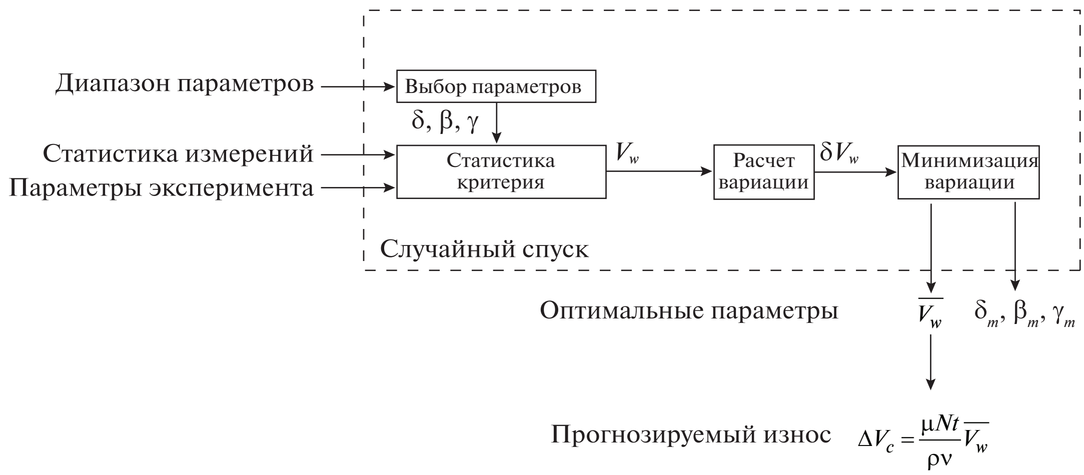

Рис. 9. Оптимальная параметризация.

Величина зазора во фрикционном контакте принималась равной глубине износа и определялась диаметром шарообразного измерительного элемента и величиной полосы износа. Учитывалась также температурная зависимость вязкости в соответствии с модифицированным соотношением Андраде. Объемный износ и полоса износа определялись максимальным и минимальным диаметрами полосы износа измерительного элемента, наблюдаемыми в эксперименте, а также углом наклона оси этого элемента к плоскости фрикционного контакта. Параметрами модели являлись коэффициент при числе Зоммерфельда в выражении для коэффициента граничного трения, а также коэффициенты при кислотности и процентном содержании серы.

Схема оптимальной параметризации этой модели отображена на рис. 9. Ее первым этапом яв-

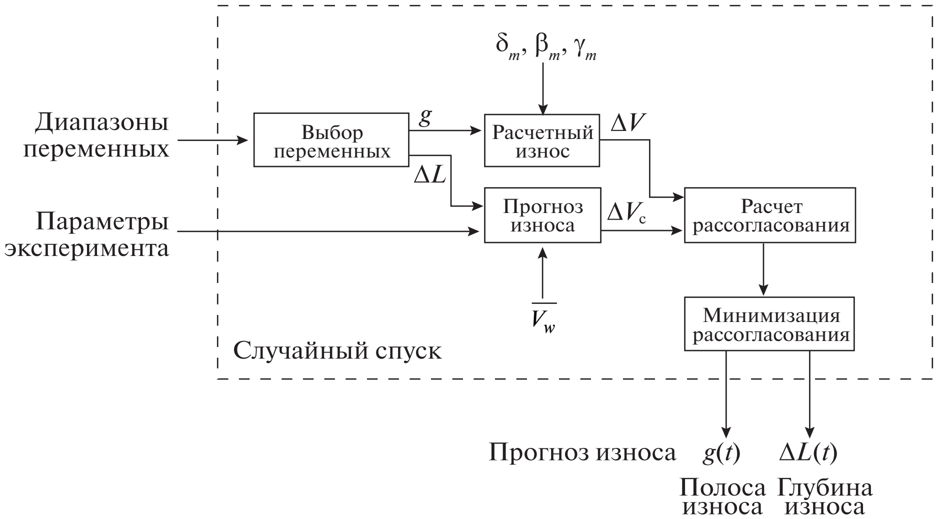

Рис. 10. Прогнозирование износа.

лялось формирование статистики критерия подобия по статистике измерений и выбранным значениям параметров. По измерениям и выбранным параметрам рассчитывался критерий объемного износа. Полученная при этом статистика использовалась для расчета вариации критерия δVw для выбранных значений параметров. Оптимальные параметры выбирались методом случайного спуска из условия минимальности указанной вариации. К их числу относилась также величина усредненного критерия подобия $\overline{Vw}$, по которой рассчитывался прогнозируемый износ.

По параметризованной модели осуществлялось прогнозирование износа на основе равенства прогнозируемого и расчетного износа. Это равенство интерпретировалось как уравнение относительно глубины и полосы износа. Оно решалось путем минимизации модуля рассогласования между расчетным и прогнозируемым износом для различной длительности в соответствии с рис. 10. Результатом этой минимизации, осуществляемой методом случайного спуска, являются временные зависимости глубины и полосы износа, интерпретируемые как прогнозы износа. Таким образом, разработанная модель износа может быть использована для формирования квалификационных норм на основании эксплуатационных ограничений на глубину износа, соответствующую заданной длительности последнего.

Проведению испытаний предшествует предварительный выбор их экстремальных условий. Параметризация критериальной модели по результатам квалификационных испытаний в данных условиях позволяет провести прогнозирование фрикционного износа, результаты которого можно интерпретировать как гарантированные нормы износа.

Таким образом, идентификация модели в рамках виртуализации может быть использована для экстраполяции лабораторных результатов на прогнозируемые условия эксплуатации объекта. В свою очередь, обратный пересчет позволяет формировать условия лабораторного эксперимента, адекватные прогнозируемым эксплуатационным условиям. Подход, ориентированный на решение таких задач, реализован, в частности, в теории подобия, а пример его применения приведен в работе [9]. Целью данного исследования являлось определение параметров квалификационных экспресс-испытаний химической стабильности окисляющихся смесей углеводородов в статических условиях. Для решения этой задачи применяются лабораторные реакторы, позволяющие изменять условия окисления в сравнении с эксплуатационными для достижения приемлемой длительности указанных испытаний. Используемые при этом методы подразделяются на методы *ускоренного окисления* и *искусственного старения*.

Методы первой группы предназначены для экспресс-оценки стабильности в ситуации, когда длительность испытаний является решающим фактором. Они предусматривают значительное повышение температуры процесса в сравнении с эксплуатационной, а также воздействие иных факторов, которое рассматривается ниже. В рамках методов второй группы осуществляется лабораторное хранение исследуемых продуктов в строго регламентированных условиях при уме-

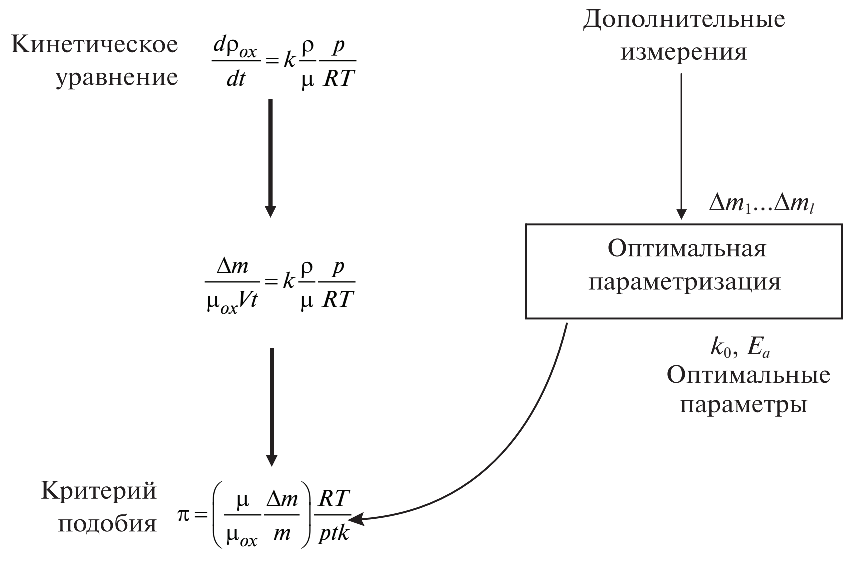

Рис. 11. Критерий химической стабильности.

ренно повышенных температурах. Преимущество этих методов перед методами искусственного окисления состоит в наиболее близком соответствии условиям реального хранения. Однако считается, что наилучшие оценки химической стабильности достигаются комплексированием методов обеих групп.

В дальнейшем исследовались методы ускоренного окисления. В ходе этого исследования была разработана критериальная модель химической стабильности углеводородных смесей, предназначенная для пересчета результатов квалификационных экспресс – испытаний к эксплуатационным условиям и включающая критерии геометрического, термодинамического и кинетического подобия. Критерий геометрического подобия может быть использован для выбора габаритов лабораторного реактора, а критерий термодинамического подобия для жидкостей представляет собой условие выбора возможного температурного режима.

Кроме того, на базе кинетического уравнения окисления углеводородов в бимолекулярном приближении был синтезирован критерий химической стабильности, представляющий собой условие динамического равновесия указанного окисления. Схема реализации критерия приведена на рис. 11. Соответствующее кинетическое уравнение имеет вид:

$$\frac{d\rho_{ox}}{dt} = k\rho_m\rho_o,$$
$$\rho_m = \frac{\rho}{\mu}, \quad (2)$$
$$\rho_o = \frac{p}{RT},$$

где ρ_{ox} – молярная плотность осаждаемого окисла; ρ_m, ρ_o – молярные плотности смеси и кислорода; ρ, μ – плотность и молярная масса смеси; p, T – парциальное давление и температура окисления.

Из уравнения (2) получаем в бимолекулярном приближении:

$$\frac{\rho_{ox}}{t} = k\frac{\rho}{\mu}\frac{p}{RT},$$

или:

$$\frac{\Delta m}{\mu_{ox} V t} = k\frac{\rho}{\mu}\frac{p}{RT},$$

где t – длительность испытаний или эксплуатации; V – объем реактора; Δm, μ_{ox} – масса осажденного окисла и его молярная масса.

Учитывая, что исходная масса смеси $m = \rho V$, получаем отсюда критерий химической стабильности:

$$\pi = \left(\frac{\mu}{\mu_{ox}}\frac{\Delta m}{m}\right)\frac{RT}{ptk} = 1. \quad (3)$$

Критерий (3) позволяет рассчитать потенциальную плотность $\frac{\Delta m}{V}$ для эксплуатационных условий. При этом решение о приемлемой стабильности смеси принимается в соответствии с установленными требованиями к этой плотности. Указанные требования с помощью критерия (3) можно также пересчитать в квалификационные нормативы и использовать для принятия решения непосредственно по результатам квалификационных испытаний.

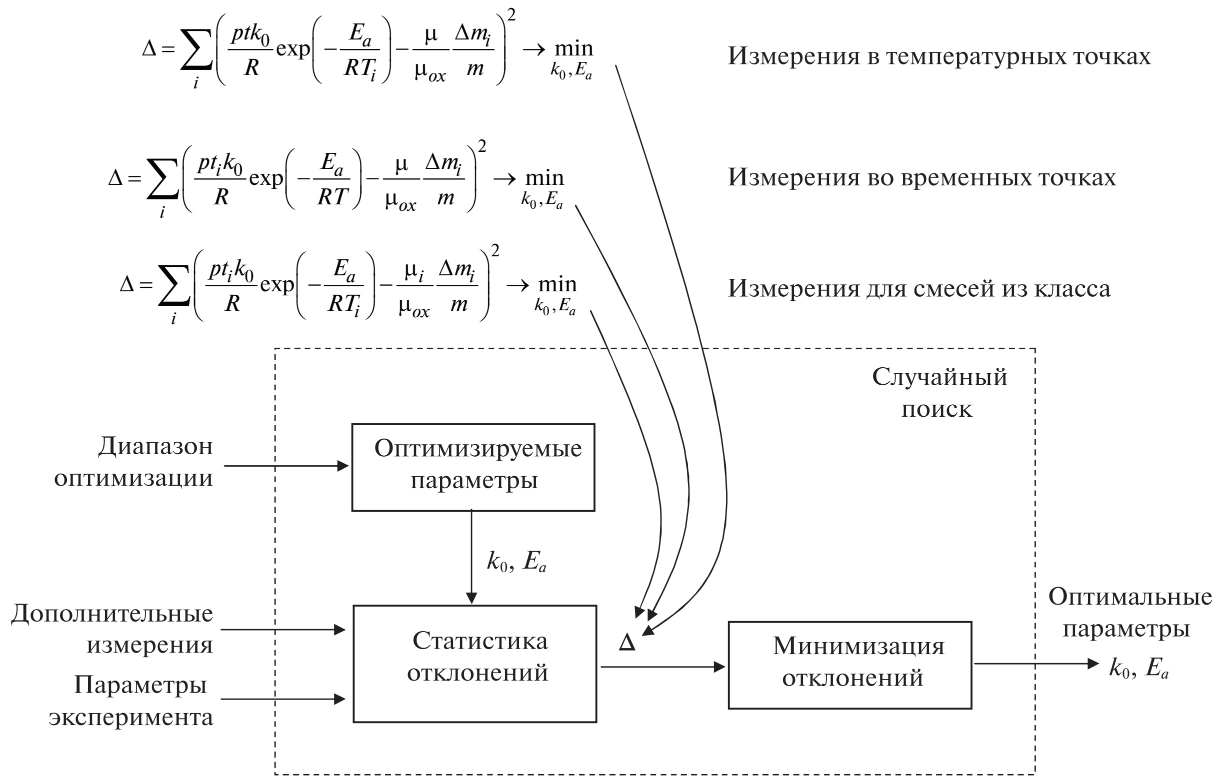

Рис. 12. Оптимальная параметризация.

Проблемой на пути реализации описанного подхода является неопределенность величины кинетического коэффициента $k = k_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$. Для ее определения проводятся измерения массы осадка Δm_i для исследуемой смеси в нескольких температурных точках T_i либо временных точках t_i. Величины номинальной скорости реакции k_0 и энергию активации E_a находим при этом из соответствующих условий минимума, вытекающих из (3) и отображенных на рис. 11.

Представляет также интерес оценка параметров скорости реакции не для одной, а для класса близких по свойствам смесей. Для ее реализации необходимо провести измерения массы осадка для этих смесей в различных температурных точках и/или в различные моменты времени. Общее условие минимума для определения параметров скорости при этом приобретает вид:

$$\Delta = \sum_i \left(\frac{pt_i k_0}{R} \exp\left(-\frac{E_a}{RT_i}\right) - \frac{\mu_i}{\mu_{ox}} \frac{\Delta m_i}{m} \right)^2 \to \min_{k_0, E_a}.$$

Решение данных задач минимизации осуществляется каким-либо численным методом, например, методом случайного поиска, схема которого приведена на рис. 12. Полученные при этом величины k_0, E_a используются для расчета k для исследуемой смеси при использовании описанной выше процедуры пересчета массы осадка в потенциальную плотность окисла.

Еще один пример использования идентификационного подхода связан с аппроксимацией плотности нефтепродуктов. Возможный подход к решению этой задачи предусматривает построение аппроксимации, описывающей жидкое и твердое газообразное состояние углеводорода при различных температурах и давлениях [10]. Естественной базой такой аппроксимации является закон соответственных состояний Ван дер Ваальса, в соответствии с ним все вещества подчиняются единому уравнению состояния в приведенных переменных. Для оценки свойств плотного газа или жидкости используется уравнение Менделеева–Клапейрона, дополненное фактором сжимаемости:

$$\rho = \frac{\mu p}{zRT}, \tag{4}$$

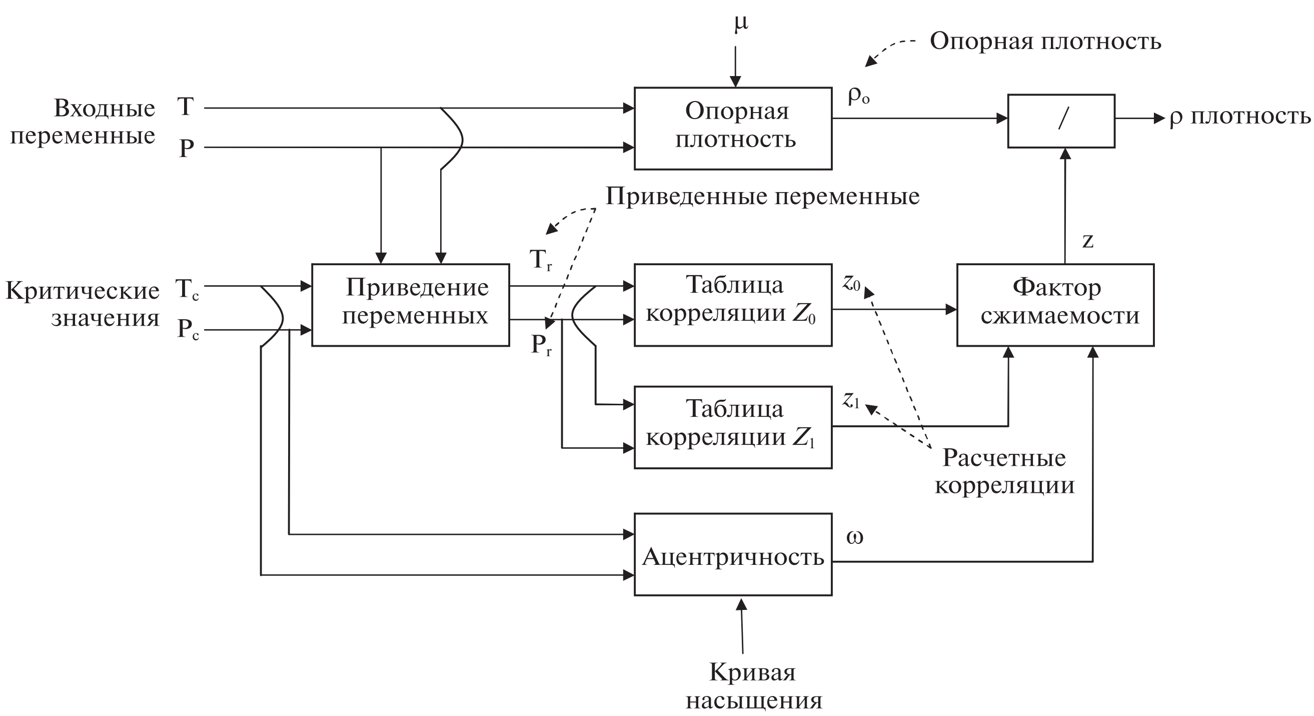

Рис. 13. Схема оценки плотности.

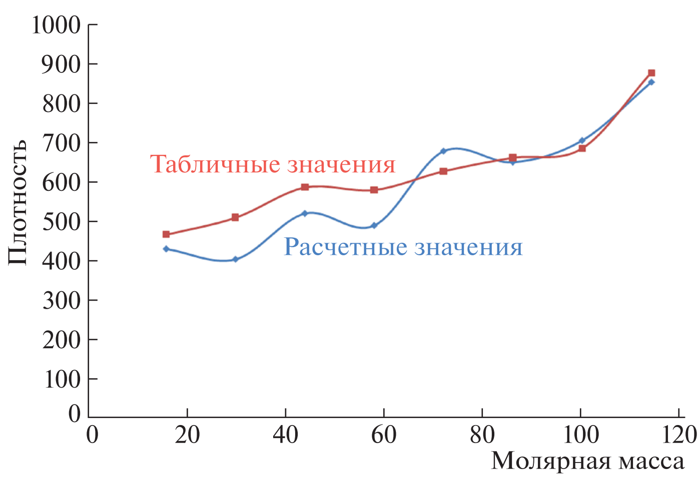

Рис. 14. Плотности при нормальных условиях (применение корреляционных таблиц).

где p, T – давление и температура углеводорода; μ – молярная масса углеводорода; z – фактор сжимаемости.

Последний характеризует отклонение параметров исследуемого углеводорода от состояния идеального газа с той же молярной массой. В частности, в рамках этого подхода могут быть построены модифицированные алгоритмы оценки плотности углеводородов. Схема указанной оценки плотности приведена на рис. 13. Согласно закону соответственных состояний, зависимость фактора сжимаемости от приведенных переменных инвариантна для различных веществ и может быть представлена в следующей форме:

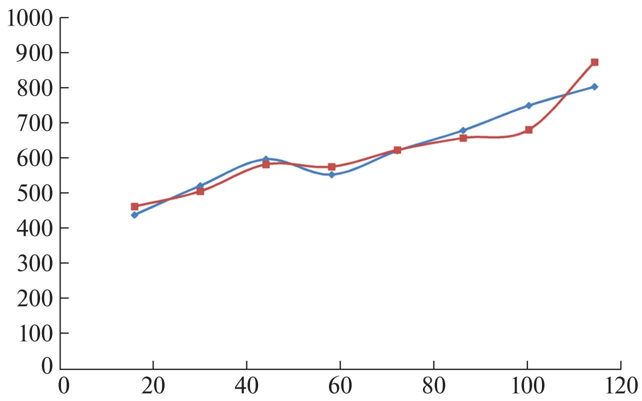

Рис. 15. Плотности при нормальных условиях (степенная аппроксимация сжимаемости).

$$z(p_r,T_r)=z_0(p_r,T_r)+\omega z_1(p_r,T_r),$$
$$p_r=\frac{p}{p_c},$$
$$T_r=\frac{T}{T_c},$$

где p, T — входные давление и температура; p_r, T_r — приведенные давление и температура; p_c, T_c — критические давление и температура; z_0, z_1 — величины корреляций; ω — величина ацентричности.

Величины корреляций рассчитываются по соответствующим таблицам путем их двумерной интерполяции. Входами этих таблиц являются приведенные давления и температуры, рассчитываемые по соответствующим критическим параметрам. Величина ацентричности рассчитывается в соответствии с соотношением $\omega=\lg\frac{P_c}{P_s}-1$, где P_s — давление насыщения углеводорода при температуре $T_s=0.7T_c$. Расчет давления насыщения ведется по кривым насыщения углеводородов. Результаты расчета плотности углеводородов при нормальных условиях для первых восьми алканов, а также табличные значения плотностей приведены на рис. 14. Сравнение показывает, что определенное соответствие плотностей имеет место для сравнительно тяжелых алканов, а погрешность расчета для легких алканов велика. Отсюда вытекает необходимость скорректировать использованный алгоритм оценки плотности.

Как и ранее, при оценке плотности будем исходить из соотношения (4), представляя фактор сжимаемости в виде $z=1-e^{\alpha}p_r^{\beta}T_r^{\gamma}$. Отсюда следует:

$$\sum_{i=1}^{8}\left(\rho_{ti}-\frac{\rho_{0i}}{z_i(\alpha,\beta,\gamma)}\right)^2\to\min_{\alpha,\beta,\gamma},$$
$$\rho_{0i}=\frac{\mu p_i}{RT_i},$$
$$z_i=1-e^{\alpha}p_{ri}^{\beta}T_{ti}^{\gamma}.$$

Таким образом, в отличие от традиционного алгоритма, основанного на использовании таблиц корреляций, в модифицированных алгоритмах используется представление фактора сжимаемости в виде степенной функции приведенных температуры и давления. Введенные параметры α, β, γ являются настроечными и выбираются методом наименьших квадратов из условия соответствия расчетных и табличных плотностей при нормальных условиях. Результаты расчета плотности углеводородов при нормальных условиях для первых восьми алканов, а также табличные значения плотностей приведены на рис. 15.

Анализ указанных зависимостей показывает, что в отличие от традиционного расчета на основе таблиц корреляций, модифицированные расчеты на основе степенной аппроксимации сжимаемости обеспечивает лучшую точность для легких алканов. Более тяжелые алканы лучше описываются традиционным алгоритмом расчета. Возможным выходом в этой ситуации является комплексирование рассмотренных алгоритмов расчета, обеспечивающее сравнительно точную оценку для широкого диапазона углеводородов.

ВЫВОДЫ

1. Традиционные квалификационные испытания интерпретируются как частный случай полунатурного эксперимента, в котором лабораторная установка играет роль физической модели системы, включающей исследуемый объект. Виртуализация представляет собой переход от физических к математическим моделям системы и объекта и допускает виртуальную квалификацию, т.е. реализацию квалификационных испытаний в виде численного эксперимента. Очевидным преимуществом виртуальной квалификации является ограничение количества натурных экспериментов, используемых только для калибровки математических моделей, и, следовательно, снижение затрат на их проведение.

2. Виртуализация позволяет осуществить экстраполяцию лабораторных результатов на штатные условия эксплуатации, а также обратный пересчет этих условий в адекватные параметры квалификационного эксперимента. Эффективность виртуализации продемонстрирована на примерах

оптимизации математических моделей, совершенствования квалификационных экспериментов и прогнозирования их результатов, а также использования критериальных моделей для адекватной параметризации квалификационных экспериментов по эксплуатационным характеристикам.

3. Упрощенная модель двигателя внутреннего сгорания предназначена для моделирования влияния химмотологических и трибологических факторов на динамику двигателя и его кпд. Она основывалась на соотношении для баланса мощности двигателя и его нагрузки, создаваемой асинхронной машиной в генераторном режиме. Ее особенностью является то, что для имитации динамики давления в цилиндре использовалась индикаторная диаграмма двигателя. Учет трения в рамках модели базировался на аппроксимации кривой Герси–Штрибека и ее использовании для расчета коэффициента смешанного трения в зависимости от числа Зоммерфельда. Ввод в состав этого числа факторов, учитывающих износ и загрязнение пары поршень–цилиндр позволил осуществить моделирование этих процессов и качественно оценить их влияние на динамику смазочной способности и кпд двигателя.

4. Более полное исследование влияния химмотологических характеристик возможно с использованием многофункциональной модели двигателя внутреннего сгорания, которая объединяет субмодели его основных подсистем. К их числу относятся субмодели смесеобразования, тепловыделения и газообмена в цилиндре, модель кривошипно-шатунного механизма, а также вспомогательные субмодели, предназначенные для имитации состава выхлопа и охлаждения двигателя. Проведенные численные эксперименты подтвердили качественную адекватность построенной модели.

5. На основе анализа противоизносных свойств смазывающего топлива построена критериальная модель объемного износа, предназначенная для прогнозирования величины последнего при заданных условиях. Оптимальная параметризация критериальной модели базировалась на интерпретации критерия износа как инварианта с минимальной вариацией. При этом соотношение, связывающее критерий объемного износа с его усредненным значением, интерпретировалось как уравнение связи между величиной износа и влияющими на него факторами. Это позволило использовать данное уравнение для прогнозирования величины износа в заданных условиях и для различных сроков эксплуатации. Синтезированную таким образом критериальную модель было предложено использовать для прогнозирования износа в экстремальных условиях и формирования соответствующих квалификационных нормативов.

6. Для аппроксимации плотности нефтепродуктов было предложено использовать модельно-ориентированную идентификацию. В рамках этого подхода построен модифицированный алгоритм оценки плотности углеводородов, базирующийся на использовании закона соответственных состояний. В отличие от традиционного алгоритма, основанного на использовании таблиц корреляций, в модифицированном алгоритме используется представление фактора сжимаемости в виде степенной функции приведенных температуры и давления. Параметры этого представления калибруются методом наименьших квадратов по результатам сравнения расчетных и табличных значений плотностей углеводородов при нормальных условиях. Показано, что для легких алканов модифицированный алгоритм обеспечивает лучшую точность в сравнении с традиционным.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Моисеев А.А.* Виртуализация квалификационных испытаний // Промышленные АСУ и контроллеры. 2015. № 10. С. 40.
2. *Моисеев А.А.* Адаптация идентификационных моделей // Промышленные АСУ и контроллеры. 2015. № 6. С. 65.
3. *Моисеев А.А.* Упрощенная математическая модель двигателя внутреннего сгорания // Прикладная физика и математика. 2016. № 3. С. 29.
4. *Моисеев А.А.* Многофункциональная динамическая модель двигателя внутреннего сгорания // Промышленные АСУ и контроллеры. 2017. № 6. С. 23.
5. *Кондратенко В.В., Моисеев А.А.* Факторный анализ в квалификационном нормировании фрикционного износа / Тезисы докладов VI международной научно-технической конференции “Проблемы химмотологии: от эксперимента к математическим моделям высокого уровня”, М., РГУ им. Губкина, 2016. С. 102.
6. *Моисеев А.А.* Критериальная модель фрикционного износа / Труды 25 ГОСНИИ МО РФ, Вып. 57. М., “Перо”, 2016. С. 241.
7. *Моисеев А.А.* Критериальная модель квалификационных испытаний на износ // Инженерная физика, 2015. № 12. С. 30.
8. *Моисеев А.А.* Критериальное моделирование в формировании квалификационных нормативов // Вестник НИЯУ МИФИ. 2016. Т. 5. № 5. С. 414.

9. *Моисеев А.А.* Критериальная модель химической стабильности в статических условиях // Наукоемкие технологии в машиностроении. 2017. № 10. С. 42.

10. *Моисеев А.А.* Модифицированная оценка плотности углеводородов // Вестник ТюмГУ. Физико-математическое моделирование. Нефть, газ, энергетика. 2016. Т. 2. № 3. С. 73–84.

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI", 2019, vol. 8, no. 6, pp. 553–568

Virtualization in Chimmotology Investigations

A. A. Moiseev[#]

NPP Technos-RM (Technos-RM Research and Production Enterprise), Mytischi, 141002 Russia

[#]*e-mail: slow.coach@yandex.ru*

Received April 23, 2019; revised August 31, 2019; accepted September 17, 2019

Abstract—Qualification tests were interpreted as specific case of semi—natural experiment where laboratory plant takes part of environment physical model with studied object. In this situation virtualization represents transfer from physical to mathematical models and allows virtual qualification, i.e. qualification test implementation in form of numerical experiment. Virtualization permits performing extrapolation of laboratory results to normal exploitation conditions and recalculation of these conditions to qualification experiment parameters. Virtualization effectiveness demonstrated at math models optimization, qualification experiments correction and their results forecasting, at criteria models application for qualification experiments adequate parameterization on exploitation characteristics. Models of internal combustion engine were created for investigation of tribological and chimmotolologcal factors influence on engine dynamics end effectiveness. They are based on balance relation and differ with method of cylinder pressure imitation only. Friction influence was based on Gersy—Streebeck curve approximation and its use for friction coefficient calculation in dependence of Sommerfeld's number. Basing on anti—wear properties investigation criteria model of volume wear was developed and used for wear evaluation at specified conditions. It was proposed to use this model for wear forecast at extreme conditions and forming of corresponding qualification normative. For oils density approximation model — oriented identification was proposed to use. Toward this end, modified algorithm was built which is based on law of corresponding states. In contrast to usual algorithm based on correlation tables use modified algorithm uses density presentation in form of power function of oil pressure and temperature. It was shown that for light oils modified algorithm provides better precision in comparison with usual one.

Keywords: qualification tests, semi-natural experiment, numerical experiment, physical model, virtualization, virtual qualification, criteria model, Gersy—Streebeck curve, Sommerfeld's number, anti-wear properties, qualification normative, identification, oils, law of corresponding states, compressibility factor

DOI: 10.1134/S2304487X19060051

REFERENCES

1. *Moiseev A.* Qualification tests virtualization, *Industrial Automatic Control Systems and Controllers*, no. 10, 2015, p. 40.

2. *Moiseev A.* Identification models adaptation, *Industrial Automatic Control Systems and Controllers*, no. 6, 2015, p. 65.

3. *Moiseev A.* Simplified mathematical model of internal-combustion engine, *Applied Physics and Mathematics*, no. 3, 2016, p. 29.

4. *Moiseev A.* Multifunctional dynamical model of internal combustion engine, *Industrial Automatic Control Systems and Controllers*, 2017, no. 6, p. 23.

5. *Kondratenko V., Moiseev A.* Factor analysis in qualification quotation of friction wear, *Thesises of VI scientific*

conference "Problems of himmotology: from experiment to high level math models", Moscow, Gubkin university of oil and gas, 2016, p. 102.

6. *Moiseev A.* Criteria model of frictional wear, *Proceedings of 25 State himmotology institute*, issue 57, Moscow, "Pero", 2016, p. 241.
7. *Moiseev A.* Criteria model of qualifying wear tests, *Engineering physics*, no. 12, 2015, p. 30.
8. *Moiseev A.* Criteria modeling at the formation of qualification standards, *Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI"*, 2016, vol. 5, no. 5, p. 414.
9. *Moiseev A.* Criteria model of chemical stability at static conditions, S*cience intensive technologies in mechanical engineering*, no. 10, 2017, p. 42.
10. *Moiseev A.* Modified Estimation of Oils Density, *Tyumen State University Herald. Physical and Mathematical Modeling. Oil, Gas, Energy*, 2016, vol. 2, no. 3, pp. 73–84.

ВЕСТНИК НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ЯДЕРНОГО УНИВЕРСИТЕТА "МИФИ", 2019, том 8, № 6, с. 569–576

ПРИКЛАДНАЯ МАТЕМАТИКА И ИНФОРМАТИКА

УДК 004.032.26

МОДЕЛЬ НЕЙРОННОЙ СЕТИ ДЛЯ ВКЛЮЧЕНИЯ СИНТАКСИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ ПРЕДЛОЖЕНИЯ В ЗАДАЧУ КЛАССИФИКАЦИИ ПОЛА АВТОРА РУССКОГО ТЕКСТА

А. Г. Сбоев[1,2,*], А. А. Селиванов[1], Р. Б. Рыбка[1], И. А. Молошников[1], Д. С. Богачев[1,3]

[1] *Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт", Москва, 123098, Россия*

[2] *Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", Москва, 115409, Россия*

[3] *Московский физико-технический институт (Национальный исследовательский университет), Москва, 141701, Россия*

**e-mail: sag111@mail.ru*

Поступила в редакцию 07.10.2019 г.
После доработки 11.10.2019 г.
Принята к публикации 15.10.2019 г.

В исследовании предлагаются нейросетевые методы на базе глубоких нейронных сетей с слоями долговременной краткосрочной памяти (LSTM) для включения синтаксической структуры в решение задачи классификации русских текстов. Разработаны и опробованы два подхода обработки синтаксических структур. В первом синтаксическая структура предложения преобразуется в последовательность путей с использованием разработанного алгоритма обхода графа. Второй подход основан на графовой сверточной сети. Для получения синтаксических признаков предложений сравнивались два различных синтаксических парсера. Для проверки моделей была выбрана задача профилирования автора по полу с использованием двух корпусов размеченных текстов, собранных на основе метода краудсорсинга и очного опроса. Было рассмотрено несколько вариантов наборов признаков исходных данных для кодирования слов текстов: морфологические бинарные векторы, векторные представления слов на основе модели FastText, а также их комбинации. В результате показано, что включение синтаксической структуры предложения в пространство входных признаков для задачи классификации пола автора текста позволяет улучшить известные точности в среднем на 4% для корпусов RusPersonality и 7% для корпуса Gender Imitation Crowdsource "a". Итоговая точность по метрике f1 составляет 84% и 83% соответственно.

Ключевые слова: машинное обучение, искусственные нейронные сети, обработка естественного языка, автоматизированный анализ текстов, графовые нейронные сети, авторское профилирование, определение пола автора текста

DOI: 10.1134/S2304487X19060130

1. ВВЕДЕНИЕ

Область анализа текстов на естественном языке включает в себя широкий спектр задач, решение которых имеет высокую научную и практическую значимость. Результаты автоматической обработки текстов могут быть использованы в маркетинге, юриспруденции, медицине и управлении. Сложность таких задач заключается в том, что не существует оптимального представления текста в виде математической сущности без потерь информации, так как текст, как целое, не сводится к отдельным составляющим – предложениям, словам и символам.

В процессе развития данной области были созданы различные подходы интерпретации текстов для последующей машинной обработки: частотные (дистрибутивные модели word to vec [1]), модели последовательной обработки (рекуррентные модели RNN, LSTM [2], Convolutional LSTM [3]) и, наконец, последние наработки – модели, которые учитывают структуру текста (Tree LSTM [4], Attention Tree LSTM [5]).

Как показывают результаты экспериментов из упомянутых выше статей, использование информации о структуре предложения позволяет решать задачи определения эмотивности и семантической близости предложений с более высокой точностью, чем раньше, что приводит к выводу об информационной значимости структуры предложения в рамках данных задач.

Также стоит принять во внимание возможность выделения структуры текстов с высокой точностью при помощи автоматических средств "парсеров" [6–8], что позволяет использовать любые выборки текстов без предварительно выделенной структуры, а значит расширяет область применения таких моделей.

Наконец, не для всех задач существуют выборки текстов значительной величины – зачастую требуется ручная разметка в рамках классификационной задачи с привлечением экспертов в определенной области. В данном случае необходимо создать такое признаковое пространство, которое бы характеризовало тексты, их отличительные особенности, достаточным образом для абстрагирования общей информации при помощи методов машинного обучения.

Таким образом, актуальной представляется цель данного исследования – разработка топологии искусственной нейронной сети для анализа текстов, представленных в виде деревьев зависимостей.

В качестве практической задачи, на которой будет исследована разработанная топология, выступает задача определения пола автора русскоязычного текста. Данная задача многообразна с точки зрения использования различных категорий признаков для описания текста и позволит подробно оценить вклад добавления различных категорий параметров с учетом структуры русскоязычного текста, выраженной через деревья зависимости отдельных предложений.

2. ОБЗОР ЛИТЕРАТУРЫ

В настоящее время учет структуры графа в задачах машинного обучения возможен на основе двух классов подходов: использование векторного представления графа (подграфа) в качестве входных данных модели машинного обучения или использование особых топологий нейронных сетей, позволяющих учитывать структуру графа в процессе обучения.

К первому классу методов относятся, например, node2vec [10], graph2vec [11]. Ко второму классу методов относятся TreeLSTM [4], TreeLSTM с механизмом внимания [5], графовые конволюционные сети [12].

Node2vec. Алгоритм node2vec позволяет создать векторное представление для узлов графа таким образом, чтобы в низкоразмерном пространстве признаков максимизировать вероятность сохранения информации о связях между соседними узлами графа. Алгоритм основан на процедуре смещенного случайного обхода, которая позволяет совместить преимущества от стратегий поиска в глубину и в ширину. В оригинальной статье также определяют такое понятие, как случайный обход второго порядка, построение пути в данном случае определяется двумя параметрами: p и q, соотношение которых определяет насколько быстро алгоритм покинет окружение корневого узла u.

Для создания векторного представления узла используется алгоритм skip-gram [1], при этом последовательность узлов в пути рассматривается аналогичным образом, как рассматривается последовательность слов в word2vec.

Принципы обхода дерева, которые лежат в основе node2vec, используются в разработанном подходе, описанном в разделе 3.2.

С точки зрения рассматриваемой в настоящей статье задачи (классификация текстов на основе информации о синтаксической структуре предложений), также можно заметить, что методы рассчитаны на графы с богатым числом связей и узлов, в пределах которых происходит “поиск” схожих закономерностей (структурной идентичности, кластеров узлов), построение на их основе пространства, которое позволяет получить векторное представление для узлов графа, а синтаксические графы представляют собой деревья, где у каждого узла число связей значительно меньше, чем в рассматриваемых в публикациях наборах данных.

TreeLSTM, TreeLSTM с механизмом внимания. TreeLSTM – это древовидная структура нейронной сети, которая является обобщением классической LSTM.

Описанная архитектура реализует возможность для каждой ячейки LSTM получать информацию от нескольких ячеек-”потомков”, таким образом обеспечивая рекурсивный обход дерева, при этом обновление внутреннего состояния блока зависит от состояния всех дочерних блоков. Это позволяет TreeLSTM блоку взвешенно объединять информацию от дочерних блоков и анализировать древовидную структуру, в то время, как обычный слой LSTM может быть использован только для анализа линейных последовательностей.

Недостатком предложенного подхода является необходимость наличия разметки на уровне фраз (т.е. метки для каждого узла графа), что сильно сужает спектр возможных задач до тех, где такая разметка присутствует в наборах данных – в описываемом исследовании используется Stanford Sentiment Treebank.

Чтобы создать возможность для решения задач с разметкой на уровне предложений, в статье [5] был предложен подход с использованием механизма внимания и словарей полярных слов. Показано, что полярные (эмотивные) словари вносят больший вклад в прирост точности решения задачи сентимент-анализа предложений на японском языке, чем использование механизма внимания. При этом авторы указывают, что данные словари используются как своеобразный аналог разметки на уровне фраз. Также в исследовании приводится точность работы метода для Stanford Sentiment Treebank в случае, если учитывается только метка всего предложения – можно заметить, что отсутствие разметки на уровне фраз приводит к снижению точности решения задачи на 8%.

Графовые сверточные сети. Графовые сверточные сети (ГСС) явно используют структуру входных данных в виде графа в рамках нейросетевых топологий. При заданном графе $G = (V, E)$ (V – множество вершин, E – множество ребер), ГСС принимает на вход: матрицу признаков X размерности $N \times F$, где N это количество узлов графа, а F – размерность признаков каждого узла; матрицу смежности A графа размера $N \times N$, которая несет информацию о структуре графа.

Внутренние слои ГСС можно представить в виде $H_i = f(H_{i-1}, A)$, где f – нелинейная функция, H_{i-1} выход предыдущего слоя ($H_0 = X$), а H_i матрица $N \times F_i$ является представлением каждого узла графа в новом пространстве признаков. Таким образом, ГСС позволяет классифицировать узлы графа, либо же получать для них различные векторные представления, учитывающие графовые признаки.

Таким образом, в качестве основы для метода классификации русскоязычных текстов с использованием синтаксической структуры предложений могут быть использованы методы графовых сверточных сетей и совмещение концепций, представленных в методах на основе векторного представления графа и использования рекуррентных нейронных сетей (LSTM), поскольку, с одной стороны, позволяют в процессе обучения нейронной сети учесть как структурные особенности графа, так и векторное представление его узлов, с другой, частично компенсируют описанные у представленных методов недостатки, такие как, например, необходимость разметки каждого узла классифицируемого графа, специфичная форма представления зависимостей слов в предложении, отсутствие адаптации модели к конкретной задаче.

3. МЕТОДЫ И ПОДХОДЫ

3.1. Элементы нейросетевой топологии

Слой долгосрочной кратковременной памяти [2]. LSTM – это топология искусственных нейронных сетей, используемая для обработки последовательностей. Отличительной ее особенностью является наличие "памяти" и механизмов ее контроля, которые позволяют решить проблему "затухания градиента" при длинных последовательностях данных.

Глобальная операция объединения (global max-pooling) [20]. Операция, основанная на последовательном просмотре многомерной матрицы "окном", смещаемым так, чтобы в конечном счете покрыть всю матрицу. При этом для каждого положения окна в матрице находится максимальное значение среди элементов в окне. Глобальный пулинг – вариант пулинга, при котором матричный вектор многомерных данных преобразуется в вектор максимальных значений по каждой матрице $m \times n$, т.е. матричный вектор $m \times n \times k$ преобразуется в $1 \times 1 \times k$, где k – элементы последовательности данных.

Полносвязный слой. Полносвязный слой является базовым элементом искусственных нейронных сетей. Каждый слой состоит из нейронов, которые принимают на вход произведение активностей прошлого слоя на матрицу весов, добавляя к результату "смещение" (bias). Далее применяется функция активации, а полученные результаты являются выходными активностями слоя. Соединение подобных слоев позволяет обеспечить нелинейное преобразование данных, что лежит в основе глубокого обучения.

В работе использовано 3 типа функций активации: усеченное линейное преобразование (ReLU), сигмоидальная функция, многомерная логистическая функция.

Dropout [21]. Техника регуляризации в нейронных сетях, которая позволяет препятствовать явлению "переобучения" за счет случайного "отключения" части связей нейронов в выбранном слое нейронной сети.

Графовый сверточный слой (ГСС) [12]. Графовые сверточные сети являются инструментом на основе нейронных сетей, разработанным специально для работы с графами и явно использующим их структурную информацию. При заданном графе $G = (V, E)$ (V – множество вершин, E – множество ребер), ГСС принимает на вход: матрицу признаков X размерности $N \times F$, где N это количество узлов графа, а F – размерность признаков каждого узла; матрицу смежности A графа размера $N \times N$, которая несет информацию о структуре графа. ГСС позволяет классифицировать узлы графа, либо же получать для них различные векторные представления.

3.2. Разработанный подход на основе анализа синтаксического окружения слов и нейросетевой топологии на базе LSTM слоев

Разработанная топология (см. рис. 1) содержит 1 LSTM-слой, 2 слоя GlobalMaxPooling с индексами 1 и 2, 1 полносвязный слой с функцией активации ReLU, 1 полносвязный слой с функцией активации Sigmoid, а также 1 полносвязный слой с функцией активации Softmax. Подход (далее Syntactic_LSTM) состоит из нескольких этапов:

1. Кодирование морфологических признаков слов текста. Каждое слово i текста j характеризуется вектором морфологических признаков, за-

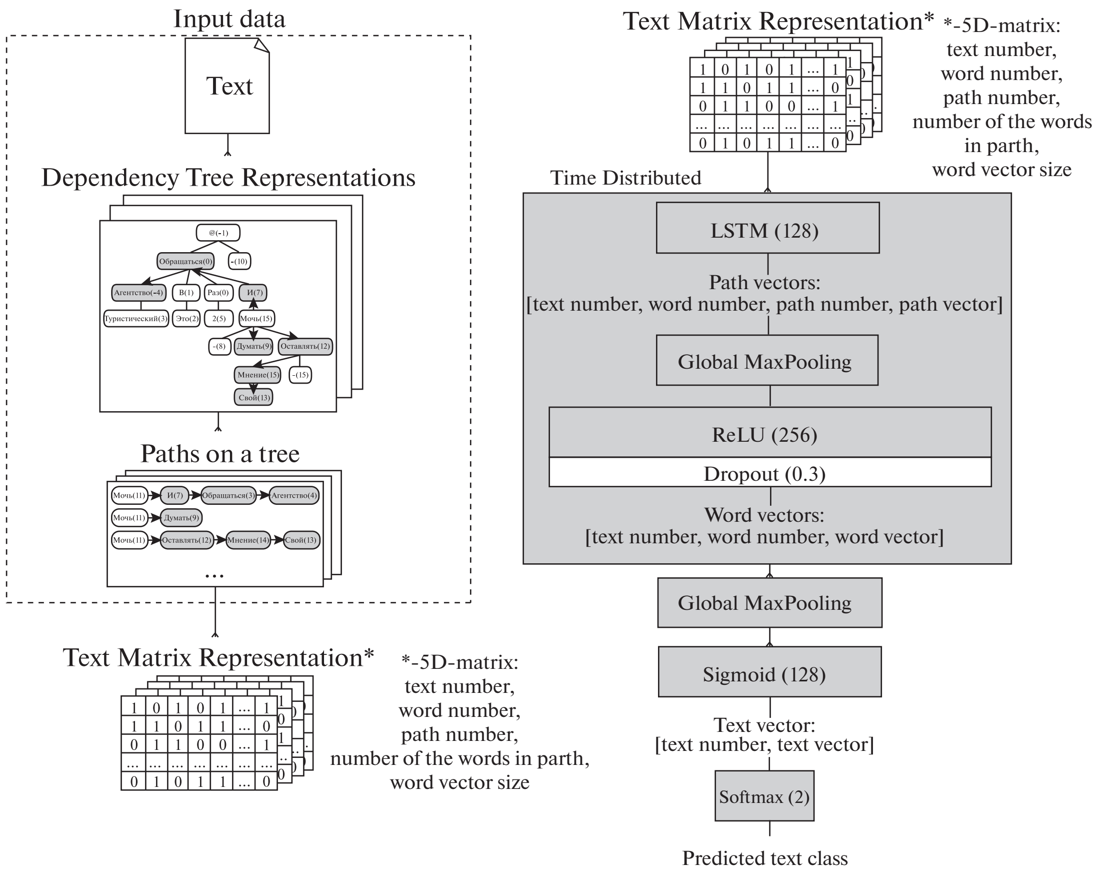

Рис. 1. Схема разработанной нейросетевой топологии на основе LSTM.

кодированных бинарно, образующих вектор размерности d_0.

2. Кодирование синтаксических признаков слов текста. Формируется набор путей $D^{(J,n)}$ для каждого слова i текста k, где J – количество путей, а n – количество слов в пути. Каждый путь $j \in J$ характеризуется матрицей $X^{(nd0)}$. Матрица X обрабатывается слоем LSTM размерности d_1, в результате чего образуется $\mathbf{v}_j$ вектор пути j. Все закодированные пути слова i текста k образуют матрицу $V^{(J,d1)}$. Далее матрица $V_{(i,k)}$ обрабатывается последовательно слоями GlobalMaxPooling, ReLU_1, и результатом обработки является вектор закодированных морфо-синтаксических признаков слова i текста k: $w_{(i,k)}$ размерности d_2 (количество нейронов в слое ReLU). Таким образом, весь k текст из m слов представляется в виде матрицы $W^{(m,d2)}$.

3. Кодирование текста. Для преобразования k текста, закодированного матрицей $W^{(m,d\_2)}$ используется последовательная обработка слоями $\mathrm{GlobalMaxPooling}_2$ и $\mathrm{Sigmoid}_1$. В результате образуется матрица $M^{(K,d3)}$, где K – количество текстов в анализируемых данных, d_3 – размерность слоя $\mathrm{Sigmoid}_1$.

4. Классификация текста по полу автора. Итоговый пол автора текста определяется после обработки матрицы $M^{(K,d3)}$ полносвязным слоем с функцией активации Softmax.

3.3. Разработанный подход на основе графовых сверточных сетей

Архитектура нейронной сети состоит из двухслойной ГСС и двунаправленного LSTM-слоя (BiLSTM) (далее ГСС_BiLSTM). Данная архитектура позволяет классифицировать объекты, каждый экземпляр которых представляет собой набор графов. В данной статье такими объектами являются тексты, состоящие из графов предложений. Схематически данная архитектура представлена на рис. 2.

Сначала каждое предложение текста в виде графа подается на вход ГСС, состоящей из двух слоев со 128-ю нейронами. Граф предложения представляет собой набор узлов-слов, каждому узлу соответствует вектор признаков и ребер-связей между ними. Граф в виде матрицы смежности и матрицы с признаками узлов подается в ГСС, на выходе получаются новые векторы признаков для каждого узла. Затем производится усреднение векторов всех узлов графа (предложения) для получения векторного представления предложения. Полученная последовательность векторов предложений подается на вход двунаправленному LSTM-слою (BiLSTM) с размерностью 128, полученное в результате данной процедуры представление текста поступает на вход в полносвязный слой размерности 2 (по числу целевых классов) и функцией активации SoftMax, на основе выходных значений которого определяется предсказанный для примера класс.

3.4. Корпуса данных

Разработанные подходы апробировались с использованием двух корпусов примеров, содержащих тексты с указанием пола его автора:

1. **RusPersonality**. Это представительный и валидированный лингвистами набор текстов с разметкой пола, возраста, стиля и других автороведческих параметров. Корпус содержит 1549 текстов-эссе по двум темам: "письмо другу" и "описание картины". Из них 575 текстов, где авторы мужского пола, и 974 – женского. Тексты RusPersonality были предварительно сбалансированы по классам, итоговый размер выборки составил 1150 текстов.

2. **Gender imitation crowdsource "a" (GI cs "a") –** корпус текстов, содержащий различную информацию о авторах. Собран средствами краудсорсинга с использованием заданий, составленных. Общее число текстов в корпусе GI cs – 5150. В данной работе мы использовали часть "a" из 1716 текстов с информацией о поле авторов. Тексты GI cs "a" были предварительно сбалансированы по классам, итоговый размер выборки составил 1664 текста.

Для получения синтаксических деревьев предложений было использовано два различных парсера: UDPipe [18] и парсер, описанный в [19]. Результаты приводятся для данных, обработанных каждым автоматическим синтаксическим разборщиком. В качестве признаков сравниваются: вектора морфологических признаков слов (далее "Морфо"), вектора, полученные с использованием FastText модели векторного представления слов (далее "FastText"), а также их сочетание (далее "Гибрид"). В качестве baseline оценки используются алгоритм [6], показывающий текущий State-of-the-art уровень решения задачи определения пола для данных корпусов.

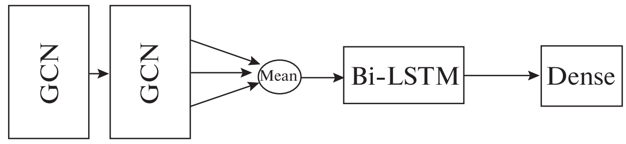

Рис. 2. Схема топологии на основе графовых сверточных сетей и BiLSTM.

4. ЭКСПЕРИМЕНТЫ

Результаты вычислительных экспериментов были получены с использованием стратифицированной кросс-валидации (Stratified Shuffle Split) с разделением исходной выборки на пять частей. На каждой итерации кросс-валидации одна часть принималась за тестировочную выборку, а оставшиеся четыре разделялись на тренировочную и валидационную. Таким образом, на каждой итерации кросс-валидации было получено следующее разбиение: 72% тренировочная выборка, 8% валидационная выборка, 20% тестировочная выборка. При этом тексты тренировочной и тестировочной выборок принадлежали разным авторам. Для оценки точности используется метрика F1-score. Полученные результаты на двух корпусах представлены в таблицах 1 и 2.

Параметры обучения для разработанной нейронной сети подобраны следующими: функция ошибки среднеквадратичная ошибка; функция оптимизации adam с коэффициентом обучения (learning rate), равным 0.001, beta 1 = 0.9, beta 2 = = 0.999. Количество текстов, обрабатываемых за 1 цикл работы сети 4, размеры слоев: d_0 – 48 для GI cs "a", 52 для RusPersonality, d_1 – 128, d_2 – 256, d_3 – 128. В рамках обучения использовалась техника раннего останова с последующим восстановлением весов модели, установленных на эпохе с наименьшей ошибкой, рассчитанной на валидационной выборке. Ранний останов осуществлялся в случае, когда в течение 15-ти эпох не было снижения валидационной ошибки. Так-

Таблица 1. Результаты определения пола автора с использованием синтаксических признаков (синтаксический разборщик: [19])

	RusPersonality			GI cs "a"		
Модель/признаки	Морфо	FastText	Гибрид	Морфо	FastText	Гибрид
Syntactic_LSTM	82 ± 1	80 ± 2	82 ± 2	81 ± 2	83 ± 1	82 ± 2
ГСС_BiLSTM	84 ± 1	69 ± 2	82 ± 4	82 ± 2	60 ± 2	81 ± 2
[6]	79 ± 3	75 ± 4	76 ± 5	73 ± 8	73 ± 9	75 ± 4

Таблица 2. Результаты определения пола автора с использованием синтаксических признаков (синтаксический разборщик: UDPipe)

	RusPersonality			GI cs “a”		
Модель/признаки	Морфо	FastText	Гибрид	Морфо	FastText	Гибрид
Syntactic_LSTM	83 ± 2	82 ± 2	82 ± 2	82 ± 1	82 ± 1	83 ± 2
ГСС_BiLSTM	84 ± 1	68 ± 2	81 ± 2	81 ± 2	59 ± 2	81 ± 2
[6]	78 ± 2	81 ± 4	77 ± 3	71 ± 8	71 ± 7	77 ± 4

же был использован механизм циклического learning rate [22] с верхней границей, равной 0.01.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На примере задачи авторского профилирования в части определения пола показано, что учет синтаксической структуры повышает точность классификации текстов.

Подход, основанный на рекуррентных и полносвязных слоях нейронной сети с построением набора путей на синтаксическом дереве для каждого слова, позволяет получить средний прирост f1-меры равный 3% в сравнении с результатом, опубликованным для корпуса RusPersonality и 7% для корпуса Gender Imitation Crowdsource “a”. Подход, основанный на графовой сверточной сети обеспечивает средний прирост f1-меры 4% для корпуса RusPersonality, 6% для корпуса Gender Imitation Crowdsource “a”.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа была выполнена с использованием оборудования центра коллективного пользования “Комплекс моделирования и обработки данных исследовательских установок мега-класса” НИЦ “Курчатовский институт”, http://ckp.nrcki.ru/.

ФИНАНСИРОВАНИЕ

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 18-29-10084 “мк”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Mikolov T., Sutskever I., Chen K., Corrado G.S., Dean J.* Distributed representations of words and phrases and their compositionality. Advances in neural information processing systems. MIT Press. 2013. V. 2. P. 3111–3119.
2. *Greff K., Srivastava R.K., Koutnık J., Steunebrink B.R., Bas R., Schmidhuber J.* LSTM: A search space odyssey. IEEE transactions on neural networks and learning systems. IEEE. 2016. V. 28. № 10. P. 2222–2232.
3. *Hassan A., Mahmood A.* Deep learning approach for sentiment analysis of short texts. Proceedings of 2017 3rd international conference on control, automation and robotics (ICCAR). IEEE. 2017. P. 705–710.
4. *Tai K.S., Socher R., Manning C.D.* Improved semantic representations from tree-structured long short-term memory networks. In: arXiv preprint arXiv:1503.00075. 2015.
5. *Miyazaki R., Komachi M.* Japanese Sentiment Classification using a Tree-Structured Long Short-Term Memory with Attention. In: arXiv preprint arXiv:1704.00924. 2017.
6. *Sboev A., Moloshnikov I., Gudovskikh D., Rybka R.* A comparison of Data Driven models of solving the task of gender identification of author in Russian language texts for cases without and with the gender deception. Journal of Physics: Conference Series. IOP Publishing. 2017. V. 937. № 1. P. 012046.
7. *Sboev A., Moloshnikov I., Gudovskikh D., Selivanov A., Rybka R., Litvinova T.* Automatic gender identification of author of Russian text by machine learning and neural net algorithms in case of gender deception. Procedia computer science. 2018. № 123. P. 417–423.
8. *Sboev A., Moloshnikov I., Gudovskikh D., Selivanov A., Rybka R., Litvinova T.* Deep Learning neural nets versus traditional machine learning in gender identification of authors of RusProfiling texts. Procedia computer science. 2018. № 123. P. 424–431.
9. *LeCun Y., Bengio Y.* Convolutional networks for images, speech, and time series. The handbook of brain theory and neural networks. 1995. № 3361 (10).
10. *Grover A., Leskovec J.* node2vec: Scalable feature learning for networks. Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining 2016. ACM. 2016. P. 855–864.
11. *Narayanan A., Chandramohan M., Venkatesan R., Chen L., Liu Y., Jaiswal S.* graph2vec: Learning distributed representations of graphs. arXiv preprint arXiv:1707.05005. 2017.
12. *Kipf T.N., Welling M.* Semi-supervised classification with graph convolutional networks. arXiv preprint arXiv:1609.02907. 2016.
13. *Veličković P., Cucurull G., Casanova A., Romero A., Lio P., Bengio Y.* Graph attention networks. arXiv preprint arXiv:1710.10903. 2017.
14. *Xinyi Z., Chen L.* Capsule graph neural network, 2018.
15. *Mikolov T., Sutskever I., Chen K., Corrado G.S., Dean J.* Distributed representations of words and phrases and their compositionality. In Advances in neural information processing systems. 2013. P. 3111–3119.
16. *Shervashidze, N., Schweitzer, P., Jan van Leeuwen E., Mehlhorn K., Borgwardt K.M.* Weisfeiler-lehman graph kernels. Journal of Machine Learning Research. 2011. P. 2539–2561.

17. *Goldberg Y., Levy O.* Word2vec Explained: deriving Mikolov et al.'s negative-sampling word-embedding method. arXiv preprint arXiv:1402.3722. 2014.
18. *Straka M., Straková J.* Tokenizing, POS Tagging, Lemmatizing and Parsing UD 2.0 with UDPipe. Proceedings of the CoNLL 2017 Shared Task: Multilingual Parsing from Raw Text to Universal Dependencies. Association for Computational Linguistics. Vancouver, Canada. 2017. P. 88–99.
19. *Rybka R., Sboev A., Moloshnikov I., Gudovskikh D.* "Morpho-syntactic parsing based on neural networks and corpus data. Artificial Intelligence and Natural Language and Information Extraction, Social Media and Web Search FRUCT Conference (AINL-ISMW FRUCT). St. Petersburg. 2015. P. 89–95.
20. *Springenberg J.T., Dosovitskiy A., Brox T., Riedmiller M.* Striving for simplicity: The all convolutional net. 2014. arXiv preprint, arXiv:1412.6806.
21. *Srivastava N., Hinton G., Krizhevsky A., Sutskever I., Salakhutdinov R.* Dropout: a simple way to prevent neural networks from overfitting. The journal of machine learning research. 2014. № 15(1). P. 1929–1958.
22. *Smith L.N.* Cyclical learning rates for training neural networks. IEEE Proceedings of the Winter Conference on Applications of Computer Vision (WACV). IEEE. 2017. P. 464–472.

Vestnik Natsional'nogo issledovatel'skogo yadernogo universiteta "MIFI", 2019, vol. 8, no. 6, pp. 569–576

Neural Network Model for Classification of Text's Author Gender with Including Sentence Dependency Structure[1,2]

A. G. Sboev[a,b], A. A. Selivanov[a], I. A. Moloshnikov[a], R. B. Rybka[a], and D. S. Bogachev[a,c]

[a] National Research Center "Kurchatov Institute", Moscow, 123098 Russia

[b] National Research Nuclear University "MEPhI" (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

[c] The Moscow Institute of Physics and Technology (MIPT), Moscow, 141701 Russia

[#]e-mail: sag111@mail.ru

Received October 7, 2019; revised October 11, 2019; accepted October 15, 2019

Abstract—The research proposes the neural network methods to include a textual dependency tree structure in classification tasks of Russian texts. Author profiling task of gender identification was chosen to test the models, and two corpora used in experiments: based on a crowdsource, and in-person polling.
The first approach is based on a long short-term memory (LSTM) layers, and developed graph embedding algorithm. The second one is based on a graph convolution network and LSTM. Two syntactic parsers were used to obtain dependency trees from the texts. Input data was represented in different forms: morphological binary vectors, FastText vectors, and their combination. The developed models result was compared to the state-of-the-art, that is neural network model based on a convolutional and LSTM layers. Finally, we demonstrate that including textual dependency tree structure to input feature space improves f1-score of gender classification task on 4% for the RusPersonality dataset, and 7% for the crowdsource dataset in average. The developed models resulting f1-score is 84% and 83%, respectively.

Key words: machine learning, artificial neural networks, natural language processing, automated text analysis, graph neural networks, author profiling, author gender identification

DOI: 10.1134/S2304487X19060130

REFERENCES

1. Mikolov T., Sutskever I., Chen K., Corrado G.S., Dean J. Distributed representations of words and phrases and their compositionality. Advances in neural information processing systems. MIT Press. 2013, vol. 2, pp. 3111–3119.
2. Greff K., Srivastava R.K., Koutnık J., Steunebrink B.R., Bas R., Schmidhuber J. LSTM: A search space odyssey. IEEE transactions on neural networks and learning systems. IEEE. 2016, vol. 28, no. 10, pp. 2222–2232.
3. Hassan A., Mahmood A. Deep learning approach for sentiment analysis of short texts. Proceedings of 2017 3rd international conference on control, automation and robotics (ICCAR). IEEE, 2017, pp. 705–710.
4. Tai K.S., Socher R., Manning C.D. Improved semantic representations from tree-structured long

[1] The reported study was funded by RFBR according to the research project *№ 18-29-10084 "мк"*

[2] This work has been carried out using computing resources of the federal collective usage center Complex for Simulation and Data Processing for Mega-science Facilities at NRC "Kurchatov Institute", http://ckp.nrcki.ru/.

short-term memory networks. In: arXiv preprint arXiv:1503.00075. 2015.

5. Miyazaki R., Komachi M. Japanese Sentiment Classification using a Tree-Structured Long Short-Term Memory with Attention. In: arXiv preprint arXiv:1704.00924. 2017.

6. Sboev A., Moloshnikov I., Gudovskikh D., Rybka R. A comparison of Data Driven models of solving the task of gender identification of author in Russian language texts for cases without and with the gender deception. Journal of Physics: Conference Series. IOP Publishing. 2017, vol. 937, no. 1, p. 012046.

7. Sboev A., Moloshnikov I., Gudovskikh D., Selivanov A., Rybka R., Litvinova T. Automatic gender identification of author of Russian text by machine learning and neural net algorithms in case of gender deception. Procedia computer science. 2018, no. 123, pp. 417–423.

8. Sboev A., Moloshnikov I., Gudovskikh D., Selivanov A., Rybka R., Litvinova T. Deep Learning neural nets versus traditional machine learning in gender identification of authors of RusProfiling texts. Procedia computer science. 2018, no. 123, pp. 424–431.

9. LeCun Y., Bengio Y. Convolutional networks for images, speech, and time series. The handbook of brain theory and neural networks. 1995, no. 3361 (10).

10. Grover A., Leskovec J. node2vec: Scalable feature learning for networks. Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD international conference on Knowledge discovery and data mining 2016. ACM. 2016, pp. 855–864.

11. Narayanan A., Chandramohan M., Venkatesan R., Chen L., Liu Y., Jaiswal S. graph2vec: Learning distributed representations of graphs. arXiv preprint arXiv:1707.05005. 2017.

12. Kipf T.N., Welling M. Semi-supervised classification with graph convolutional networks. arXiv preprint arXiv:1609.02907. 2016.

13. Veličković P., Cucurull G., Casanova A., Romero A., Lio P., Bengio Y. Graph attention networks. arXiv preprint arXiv:1710.10903. 2017.

14. Xinyi, Z., Chen, L. Capsule graph neural network, 2018.

15. Mikolov T., Sutskever I., Chen K., Corrado G.S., Dean J. Distributed representations of words and phrases and their compositionality. In Advances in neural information processing systems. 2013, pp. 3111–3119.

16. Shervashidze N., Schweitzer P., Jan van Leeuwen E., Mehlhorn K., Borgwardt K.M. Weisfeiler-lehman graph kernels. Journal of Machine Learning Research. 2011, pp. 2539–2561.

17. Goldberg Y., Levy O. Word2vec Explained: deriving Mikolov et al.'s negative-sampling word-embedding method. arXiv preprint arXiv:1402.3722. 2014.

18. Straka M., Straková J. Tokenizing, POS Tagging, Lemmatizing and Parsing UD 2.0 with UDPipe. Proceedings of the CoNLL 2017 Shared Task: Multilingual Parsing from Raw Text to Universal Dependencies. Association for Computational Linguistics. Vancouver, Canada. 2017, pp. 88–99.

19. Rybka R., Sboev A., Moloshnikov I., and Gudovskikh D., "Morpho-syntactic parsing based on neural networks and corpus data. Artificial Intelligence and Natural Language and Information Extraction, Social Media and Web Search FRUCT Conference (AINL-ISMW FRUCT). St. Petersburg. 2015, pp. 89–95.

20. Springenberg J.T., Dosovitskiy A., Brox T., Riedmiller M. Striving for simplicity: The all convolutional net. 2014. arXiv preprint, arXiv:1412.6806.

21. Srivastava N., Hinton G., Krizhevsky A., Sutskever I., Salakhutdinov R.. Dropout: a simple way to prevent neural networks from overfitting. The journal of machine learning research. 2014, no. 15 (1), pp. 1929–1958.

22. Smith L.N. Cyclical learning rates for training neural networks. IEEE Proceedings of the Winter Conference on Applications of Computer Vision (WACV). IEEE. 2017, pp. 464–472.