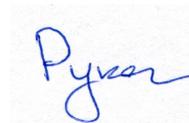


На правах рукописи



Руколайне Сергей Анатольевич

**Линейное уравнение Больцмана:  
приближение, методы численного  
решения прямых задач и задач  
оптимизации, обобщение**

Специальность 05.13.18 — математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук

Санкт-Петербург

2019

Работа выполнена в лаборатории Прикладной математики и математической физики  
Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Физико-технический  
институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук»

**Официальные оппоненты:**

**Кустова Елена Владимировна,**

доктор физико-математических наук, профессор,  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего об-  
разования «Санкт-Петербургский государственный университет»

**Горбачев Юрий Евгеньевич,**

доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник,  
ООО «Коддан Текнолоджис»

**Белопольская Яна Исаевна,**

доктор физико-математических наук, профессор,  
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего об-  
разования «Санкт-Петербургский государственный архитектурно-строительный уни-  
верситет»

**Ведущая организация:**

Федеральное государственное учреждение «Федеральный исследовательский центр  
Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук»

Защита состоится 9 октября 2019 г. в 16:00 на заседании диссертационного совета  
Д 212.229.13 на базе федерального государственного автономного образовательного  
учреждения высшего образования «Санкт-Петербургский политехнический универ-  
ситет Петра Великого» по адресу: 195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул.,  
д. 29, 1-й учебный корпус, аудитория 41.

С диссертацией можно ознакомиться в фундаментальной библиотеке и на сайте  
ФГАОУ ВО «Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого»  
<http://www.spbstu.ru/>.

Автореферат разослан « \_\_\_\_ » \_\_\_\_\_ 2019 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 212.229.13  
доктор технических наук, профессор



Б. С. Григорьев

## Общая характеристика диссертации

**Актуальность.** Линейное кинетическое уравнение Больцмана, называемое также нестационарным уравнением переноса излучения или уравнением переноса нейтронов, описывает, например, перенос теплового излучения (перенос тепловой энергии электромагнитными волнами) и нейтронов. Линейным уравнением Больцмана и уравнениями, основанными на нем, описываются также различные процессы переноса в биологии. Линейное уравнение Больцмана — это интегро-дифференциальное уравнение относительно плотности частиц в фазовом пространстве, которая в общем случае зависит от семи независимых переменных: время, три пространственные координаты, две угловые координаты (направление движения) и энергия (или скорость) частиц.

Задачи для линейного уравнения Больцмана допускают аналитическое решение в исключительных случаях, однако численное решение этих задач также представляет значительные сложности. Чтобы уменьшить сложность численного решения, по возможности применяются упрощения и приемы, использующие специфику конкретных задач, и облегчающие решение линейного уравнения Больцмана. В сильнорассеивающих средах широко применяется диффузионное приближение, описываемое уравнением диффузии. Однако оно имеет свои ограничения даже в таких средах, и до сих пор адекватная замена диффузионному приближению не найдена.

Если приближения к линейному уравнению Больцмана не позволяют получить приемлемые решения, задачи приходится решать численно. К настоящему времени разработано много методов численного решения задач для линейного уравнения Больцмана. Тем не менее до сих пор существуют задачи, решение которых представляет особые сложности. К таким задачам относятся, например, задачи переноса излучения в областях сложной формы с зеркальными границами и прозрачными зеркальными границами раздела сред с отличающимися показателями преломления. Решение этих задач представляет большой интерес, но ранее они не рассматривались.

Еще более сложными являются задачи оптимизации (оптимального проектирования), в которых требуется определить оптимальные граничные значения или/и форму области в которой решается задача для линейного уравнения Больцмана. Фактически это обратные задачи. Поэтому в задачах оптимизации к сложностям решения линейного уравнения Больцмана добавляются сложности, связанные с математической некорректностью, сопутствующей обратным задачам. Такие задачи до сих пор часто решаются методом проб и ошибок.

Линейное уравнение Больцмана является классической мезоскопической моделью переноса, в которой распределение длины свободного пробега частиц экспоненциально. Но экспоненциальное распределение длины свободного пробега имеет место только в «разреженных» средах, в которых рассеиватели некоррелированы в пространстве. Однако многие среды плотны, и препятствия в них не могут рассматриваться как некоррелированные. В таких случаях требуется обобщение линейного уравнения Больцмана, позволяющее описывать перенос с неэкспоненциальным распределением длины свободного пробега частиц. Такое обобщенное уравнение до сих пор не выводилось.

**Цели и задачи работы:** Изучение  $D_1$  приближения к линейному уравнению Больцмана, разработка методов численного решения задач переноса излучения в областях с зеркальными границами, разработка методов численного решения задач оптимального проектирования в задачах переноса, обобщение линейного уравнения

Больцмана на случай произвольного распределения длины свободного пробега частиц.

**Научная новизна:**

- $D_1$  приближение к линейному уравнению Больцмана предложено в качестве уточнения диффузионного приближения.
- Построены квадратурные схемы на единичной сфере, основанные на кусочно-квазилинейной интерполяции, которые позволяют трактовать зеркальное отражение и преломление при решении задач переноса излучения.
- Построены численные схемы решения осесимметричных задач переноса излучения с диффузными и зеркальными границами, и прозрачными зеркальными границами раздела сред с отличающимися показателями преломления.
- Разработан единый подход к численному решению задач оптимизации граничных значений или формы области в задачах переноса излучения с диффузными и зеркальными границами.
- Предложено обобщение линейного уравнения Больцмана на случай произвольного распределения длины свободного пробега частиц.

**Теоретическая и практическая значимость.** Предложенные квадратурные схемы вносят существенный вклад в теорию квадратурных схем. Разработанные численные схемы решения задач переноса излучения вносят существенный вклад в теорию методов решения таких задач. Эти схемы были реализованы в комплексе программ, который был использован при моделировании роста полупрозрачных кристаллов из расплава низкоградиентным методом Чохральского, что позволило объяснить особенности роста этих кристаллов. Получено свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ. Обобщенное линейное уравнение Больцмана — это новая математическая модель, позволяющая описывать кинетику частиц с произвольным распределением длины свободного пробега.

**Положения, выносимые на защиту:**

1.  $D_1$  приближение предложено в качестве уточнения диффузионного приближения к линейному уравнению Больцмана.
2. Построены квадратурные схемы на единичной сфере, основанные на кусочно-квазилинейной интерполяции, которые позволяют трактовать зеркальное отражение и преломление при решении задач переноса излучения методом дискретных ординат.
3. Построены численные схемы решения осесимметричных задач переноса излучения с диффузными и зеркальными границами и прозрачными зеркальными границами раздела сред с отличающимися показателями преломления.
4. Разработан комплекс программ решения осесимметричных задач переноса излучения в областях с диффузными и зеркальными границами и прозрачными зеркальными границами раздела сред с отличающимися показателями преломления.
5. Разработан единый подход к численному решению задач оптимизации граничных значений или формы области в задачах переноса излучения с диффузными и зеркальными границами.
6. Предложено обобщение линейного уравнения Больцмана на случай произвольного распределения длины свободного пробега частиц и выведено асимптотическое решение задачи Коши для этого обобщенного уравнения при малой средней длине свободного пробега частиц.

**Апробация результатов.** Основные результаты диссертационной работы докладывались на Девятой Российской национальной конференции по росту кристаллов (Москва, 2000), The Third International Symposium on Radiative Transfer (Antalya, Turkey, 2001), The Fourth International Conference on Single Crystal Growth and Heat & Mass Transfer (Обнинск, Россия, 2001), на Десятой Российской национальной конференции по росту кристаллов (Москва, 2002), на Третьей Российской национальной конференции по теплообмену (Москва, 2002), Eurotherm Seminar «Computational Thermal Radiation in Participating Media» (Mons, Belgium, 2003), The Fourth International Symposium on Radiative Transfer (Istanbul, Turkey, 2004), Eurotherm Seminar «Computational Thermal Radiation in Participating Media II» (Poitiers, France, 2006), на Четвертой Российской национальной конференции по теплообмену (Москва, 2006), на Пятой международной конференции по обратным задачам (Казань–Москва, 2007), The Fifth International Symposium on Radiative Transfer (Bodrum, Turkey, 2007), на Международной конференции «Days on Diffraction 2013» (С.-Петербург, 2013), на Международном симпозиуме «Systems Biology and Bioinformatics» (С.-Петербург, 2016), на семинарах в Физико-техническом институте им. А. Ф. Иоффе и Санкт-Петербургском политехническом университете.

**Публикации.** По теме диссертации опубликовано 27 статей, из них 16 статей в рецензируемых научных журналах, индексируемых Scopus и/или Web of Science и/или входящих в перечень ВАК (см. **Основные публикации по теме диссертации**), 10 статей в трудах научных конференций и научных сборниках и 1 препринт.

**Личный вклад автора.** Подавляющее большинство результатов, изложенных в диссертации, получено лично автором. Вклад автора в результаты, полученные в статьях, в которых он является первым автором, является определяющим. Отдельные результаты, полученные в результате совместной работы, отмечены в тексте диссертации.

**Структура диссертации.** Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и списка литературы. Текст диссертации содержит 231 страницу, включая 76 рисунков и 5 таблиц. В списке литературы 284 работы.

## Краткое содержание диссертации

**Во введении** обоснована актуальность проблем, исследуемых в диссертации, перечислены цели и задачи работы, раскрыты научная новизна, теоретическая и практическая значимость, сформулированы положения, выносимые на защиту.

**Глава 1. Линейное уравнение Больцмана и связанные с ним проблемы.** Дан обзор литературы и произведен анализ современного состояния проблем, связанных с линейным уравнением Больцмана.

**Приближения к линейному уравнению Больцмана.** Аналитические решения задач для линейного уравнения Больцмана существуют в исключительных случаях, однако численное решение этих задач также представляет значительные сложности. Сложность численного решения может быть уменьшена при помощи многогруппового приближения по энергии (или скорости), когда вся область изменения энергии разбивается на конечное число непресекающихся групп (состоящих из одного или даже нескольких интервалов), и каждая такая группа ассоциируется с фиксированной энергией из соответствующей группы. В результате исходное линейное уравнение Больцмана сводится к системе моноэнергетических (односкоростных) линейных уравнений Больцмана (с шестью независимыми переменными: одна вре-

менная, три пространственных и две угловых). Но и такие задачи представляют из себя сложную проблему. Поэтому всякий раз, когда возможно, используются различные приближения к линейному уравнению Больцмана. В сильнорассеивающих средах широко используется диффузионное приближение. Однако оно имеет свои ограничения даже в таких средах, и до сих пор адекватная замена диффузионному приближению не найдена.

**Методы численного решения задач переноса излучения.** Линейное уравнение Больцмана, описывающее перенос теплового излучения (перенос тепловой энергии электромагнитными волнами), имеет вид нестационарного уравнения переноса излучения, в котором скорость распространения равна скорости света в среде, а роль энергии играет частота электромагнитной волны. В большинстве приложений скорость света настолько велика по сравнению с характерной скоростью происходящих процессов (то есть излучение распространяется «мгновенно»), что производной по времени в уравнении переноса можно пренебречь. В результате уравнение переноса принимает вид стационарного уравнения. Но и в этом случае решение задач переноса излучения остается сложной проблемой. Для упрощения численного решения обычно пользуются многогрупповым приближением по частоте, когда весь спектр разбивается на конечное число групп (состоящих из одного или нескольких интервалов), и каждая такая группа ассоциируется с фиксированной частотой из соответствующей группы. Таким образом уравнение переноса сводится к уравнению переноса без спектральной зависимости. В случаях, когда в уравнении переноса и граничных условиях спектральной зависимостью пренебрегают, говорят о сером приближении.

В настоящее время наиболее распространенным подходом к численному решению уравнения переноса излучения является метод дискретных ординат (и метод конечных объемов, как его разновидность). Метод дискретных ординат основан на дискретизации угловой зависимости интенсивности излучения. Решение задачи переноса излучения ищется для конечного числа направлений (узловых точек на единичной сфере, дискретных ординат), причем каждому направлению сопоставляется квадратурный вес и интегралы по угловым переменным аппроксимируются квадратурными суммами. В результате такой дискретизации уравнение переноса сводится к системе уравнений в частных производных первого порядка, содержащих в качестве независимых переменных только пространственные координаты. Граничные условия для уравнения переноса преобразуются в граничные условия для полученной системы уравнений в частных производных. После дискретизации по угловым переменным осуществляется дискретизация по пространственным переменным методами конечных объемов или конечных разностей, или другими методами.

Первый шаг в методе дискретных ординат — дискретизация уравнения переноса по угловым переменным, то есть выбор квадратурной схемы на единичной сфере. Поскольку квадратурная схема оказывает существенное влияние на точность получаемого решения, к настоящему времени предложено довольно много различных квадратур на сфере. Однако имеющиеся квадратуры на сфере не позволяют в рамках метода дискретных ординат формулировать граничные условия в случае зеркального отражения и преломления на границе. Действительно, квадратуры на сфере не предполагают какого-либо аналитического представления интегрируемой функции, поэтому, поскольку направление зеркально отраженного или преломленного луча, вообще говоря, не принадлежит дискретному множеству направлений, интенсивность излучения в этих направлениях в общем случае не определена.

Одним из наиболее удачных способов пространственной дискретизации в мето-

де дискретных ординат является метод характеристик. В декартовых координатах метод характеристик концептуально прост, поскольку дифференциальный оператор в уравнении переноса действует только на пространственные переменные (угловые переменные являются параметрами), и поэтому характеристики это прямые линии. Многие задачи переноса излучения обладают осевой симметрией. Однако применение метода характеристик к осесимметричным задачам переноса излучения затруднено, поскольку в цилиндрических координатах дифференциальный оператор в уравнении переноса действует как на пространственные, так и на угловые переменные. Задачи переноса излучения в осесимметричных областях сложной формы с непрозрачными зеркальными границами и прозрачными зеркальными границами раздела сред с отличающимися показателями преломления методом дискретных ординат до сих пор не решались.

**Оптимальное проектирование в задачах переноса излучения.** Перенос тепла излучением играет существенную (а часто и решающую) роль в высокотемпературных устройствах и системах. Радиационный теплоперенос в таких системах значительно усложняет общий тепло- и массоперенос. В настоящее время проектирование таких систем осуществляется методом проб и ошибок. Очевидно, что это крайне неэффективный подход к решению задач оптимального проектирования.

Задача оптимального проектирования может быть сформулирована как обратная задача  $A(u) = f$ , где оператор  $A$  обозначает прямую задачу,  $u$  — параметры проектирования, то есть величины (или функции), от которых зависит поведение системы,  $f$  — проектные параметры, то есть величины (или функции), характеризующие поведение системы (проектные параметры  $f$  находятся в результате вычисления оператора  $A$ , то есть решения прямой задачи с заданными параметрами проектирования  $u$ ). Обратная задача заключается в нахождении таких параметров проектирования  $u$ , при которых проектные параметры  $f$  удовлетворяют заранее сформулированным требованиям. Проектными параметрами  $f$  в рассматриваемых задачах являются распределения температуры, плотности тепловых потоков на нагреваемой поверхности или на фронте кристаллизации (в установках для роста кристаллов). Параметрами проектирования  $u$  могут быть, во-первых, распределения температур или тепловых потоков на поверхности нагревателя или мощности нагревателей, во-вторых, геометрические параметры установки. В соответствии с этим будем различать два типа задач проектирования. В задачах первого типа задана геометрия установки и требуется найти оптимальное распределение температуры или теплового потока на поверхности нагревателя или распределение мощности нагревателей. Такие задачи будем называть «краевыми», поскольку в этом случае требуется найти значения функций в граничных (краевых) условиях на поверхности нагревателя. В задачах второго типа требуется найти оптимальные геометрические параметры установки при заданных граничных условиях. Эти задачи будем называть «геометрическими».

Главная проблема, возникающая при решении обратных задач, заключается в том, что эти задачи оказываются математически некорректными, когда решение  $u$  неустойчиво по отношению к возмущениям в исходных данных  $f$  (иными словами, сколь угодно малые изменения в исходных данных могут привести к сколь угодно большим изменениям в решении). Обратная задача может быть поставлена как задача минимизации: найти решение  $u$ , минимизирующее функционал невязки (целевой функционал)  $\|A(u) - f\|^2$  ( $\|\cdot\|$  — норма в соответствующем функциональном пространстве). Однако задача минимизации, так же как и исходная обратная задача, некорректна. Для решения некорректных задач требуются устойчивые методы

(методы регуляризации).

Другая принципиальная особенность описываемых обратных задач, существенно осложняющая их решение, заключается в том, что оператор  $A$  прямой задачи, вообще говоря, не может быть выражен аналитически, и его значения могут быть найдены лишь при помощи вычислений, требующих, как правило, значительного времени.

Еще одна проблема заключается в следующем. Целевые функционалы, соответствующие сложным системам, имеют обычно много локальных минимумов, требуется же найти глобальный минимум. Кажется естественным использовать в задачах минимизации таких функционалов методы поиска глобального минимума. Однако методы глобальной минимизации требуют очень много вычислений целевого функционала, порядка многих тысяч, в то время как одно вычисление целевого функционала может требовать значительного (иногда очень много) времени. Поэтому в таких задачах число вычислений целевого функционала может стать запретительно большим. Методы локальной минимизации значительно эффективнее «глобальных» методов в окрестности локального минимума, но их использование для поиска глобального минимума в общем случае проблематично. Поскольку методы локальной минимизации гораздо эффективнее вблизи локальных минимумов, представляется естественным комбинировать глобальные и локальные методы.

Наиболее эффективные методы локальной минимизации используют градиент минимизируемой функции. Но здесь возникает следующая проблема. В геометрических задачах оптимизации подлежат поверхности, а не функции. Как определить градиент (целевого) функционала, зависящего от формы поверхности? В отличие от функций множество поверхностей не имеет никакой естественной структуры линейного векторного пространства, поскольку поверхности нельзя складывать как вектора, и, поэтому, обычное определение градиента не может быть использовано.

**Неклассический перенос.** Линейное уравнение Больцмана основано на предположении об экспоненциальном распределении длины свободного пробега частиц. Это очень ограничительное предположение, и во многих случаях оно нарушается.

Экспоненциальное распределение это единственное непрерывное распределение, которое обладает свойством «отсутствия последействия» (точнее «отсутствия памяти»). Напомним, что случайная величина  $X$  обладает свойством «отсутствия последействия» (memoryless), если выполняется равенство  $P\{X > l' + l \mid X > l'\} = P\{X > l\}$ , где  $l, l'$  — произвольные. Иными словами (в рассматриваемой интерпретации) каким бы ни был (уже) свободный пробег частицы  $l'$ , распределение оставшегося свободного пробега  $l$  не зависит от  $l'$ , и оно такое же, как если бы частица только начинала свободный пробег. Поэтому, в случае неэкспоненциального распределения длины свободного пробега движение частиц не может быть описано плотностью, зависящей только от координат, времени и скорости. Необходимо введение дополнительной (восьмой) независимой переменной — длины свободного пробега.

**Глава 2.  $D_1$  приближение к линейному уравнению Больцмана [13, 15].** Исследуется  $D_1$  приближение к односкоростному линейному уравнению Больцмана

$$\frac{1}{v} \partial_t \psi + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi + (\kappa + \sigma_s) \psi = \sigma_s \int_{\mathbb{S}^2} K(\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\Omega}') \psi(\mathbf{r}, t, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' + \frac{1}{v} \frac{1}{4\pi} F, \quad (1)$$

где  $\psi(\mathbf{r}, t, \boldsymbol{\Omega})$  — фазовая плотность частиц,  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$  — координаты,  $t$  — время,  $\boldsymbol{\Omega} \in \mathbb{S}^2$  — направление движения частиц,  $v$  — скорость частиц,  $\kappa$  и  $\sigma_s$  — коэффициенты поглощения и рассеяния, соответственно,  $K$  — ядро рассеяния,  $F(\mathbf{r}, t)$  — изотропный источник частиц.

В методе сферических функций фазовая плотность частиц раскладывается в ряд по сферическим функциям  $Y_n^m$

$$\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \psi_n^m(\mathbf{r}, t) Y_n^m(\boldsymbol{\Omega}). \quad (2)$$

Ядро рассеяния также раскладывается в ряд по сферическим функциям:

$$K(\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\Omega}') = \sum_{n=0}^{\infty} K_n \sum_{m=-n}^n Y_n^m(\boldsymbol{\Omega}) \overline{Y_n^m(\boldsymbol{\Omega}')}. \quad (3)$$

Разложения (2) и (3) подставляются в уравнение (1). В результате получается бесконечная система уравнений в частных производных для функций  $\psi_n^m(\mathbf{r}, t)$ .

Диффузионное приближение относительно плотности частиц

$$u(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathbb{S}^2} \psi(\mathbf{r}, t, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega}$$

получается, если коэффициенты  $\psi_n^m$ ,  $n \geq 2$ , считать пренебрежимо малыми, а коэффициенты  $\psi_1^m$  — квазистационарными.

Классические  $P_N$  приближения,  $N \geq 1$ , получаются, если коэффициенты  $\psi_n^m$ ,  $n > N$ , в разложении (2) считать пренебрежимо малыми. Как замена диффузионному используется  $P_1$  приближение. Однако скорость распространения частиц в  $P_1$  приближении равна  $v/\sqrt{3}$  в то время как истинная скорость равна  $v$ . Добавление  $P_1$  уравнения с коэффициентом  $1/3$  к уравнению диффузии с коэффициентом  $2/3$  дает правильную скорость распространения. В результате получается  $P_{1/3}$  приближение, которое не только дает правильную скорость распространения частиц, но и во многих случаях лучше, чем  $P_1$  приближение.  $P_1$  и  $P_{1/3}$  имеют общий принципиальный недостаток: они описываются телеграфным уравнением, для которого не выполняется принцип максимума, то есть телеграфное уравнение не сохраняет неотрицательность решений, и поэтому решения задач для него могут быть нефизичны.

$D_N$  приближения,  $N \geq 1$  [Schäfer, et al., 2011], «исправляют»  $P_N$  приближения. Диффузионное приближение может рассматриваться как  $D_0$  приближение.  $D_N$  приближения получаются, если коэффициенты  $\psi_n^m$ ,  $n > N + 1$ , в разложении (2) считать пренебрежимо малыми, а коэффициенты  $\psi_{N+1}^m$  — квазистационарными. Было обнаружено [Garrett and Hauck, 2013], что качественное поведение  $D_N$  и  $P_{N-1}$  решений похоже, но  $D_N$  решения ослабляют колебательный характер  $P_{N-1}$  решений. Таким образом, двойником  $P_1$  приближения является  $D_2$  приближение, а двойник у  $D_1$  приближения отсутствует, поскольку не существует  $P_0$  приближения. Возникает вопрос: может ли  $D_1$  приближение улучшить диффузионное приближение?

$D_1$  приближение описывается уравнением в частных производных третьего порядка, выведенным в [13],

$$\tau \partial_t^2 u + (1 + \tau\gamma) \partial_t u - \tau \mathcal{D}_1 \partial_t \Delta u - [(1 + \tau\gamma) \mathcal{D}_1 + \mathcal{D}_2] \Delta u + \gamma u = F + \tau \partial_t F - \tau \mathcal{D}_1 \Delta F,$$

где

$$\tau = \frac{1}{\kappa + \sigma_1} \frac{1}{v}, \quad \mathcal{D}_1 + \mathcal{D}_2 = \frac{1}{\kappa + \sigma_1} \frac{v}{3}, \quad \mathcal{D}_1 = \frac{4}{5(\kappa + \sigma_2)} \frac{v}{3}, \quad \gamma = v\kappa, \quad \sigma_n = \sigma_s (1 - K_n).$$

При  $\tau = 0$  получается диффузионное приближение (уравнение диффузии).

Сравним приближения к уравнению Больцмана с изотропным рассеянием и почти мгновенным сосредоточенным источником с решением задачи Коши для него. Рис. 1 демонстрирует решение задачи Коши для  $D_1$  приближения с параметрами  $v = 1$ ,  $\kappa = 0$  и  $\sigma_s = 1$ . Рисунок демонстрирует также диффузионное и  $P_{1/3}$  приближения.

Во всех случаях поглощение отсутствует, источник  $F$  один и тот же.  $P_1$  приближение на рисунке не представлено, поскольку  $P_{1/3}$  приближение лучше, и нефизичное поведение  $P_1$  приближения выражено гораздо сильнее.  $D_1$  приближение демонстрирует фактически «неотрицательное» поведение. Поведение  $D_1$  приближения кардинально отличается от  $P_{1/3}$  приближения, которое демонстрирует явную нефизичность с отрицательными значениями. Мы оценили, насколько хорошо  $D_1$  решения аппроксимируют решения линейного уравнения Больцмана, полученные методом Монте Карло, в сравнении с  $D_0$  (диффузионное приближение) и  $P_{1/3}$  решениями. Невязка вычислялась в  $L_2$  норме. Невязка для  $D_1$  приближения в несколько раз меньше, чем невязка для  $P_{1/3}$  приближения. Кроме того, невязка для  $D_1$  приближения сравнима с таковой для диффузионного приближения при малых временах и значительно меньше при больших.

Таким образом,  $D_1$  приближение может быть предложено в качестве уточнения диффузионного приближения к линейному уравнению Больцмана. Тем не менее требуется более глубокое исследование  $D_1$  приближения в более широком круге задач.

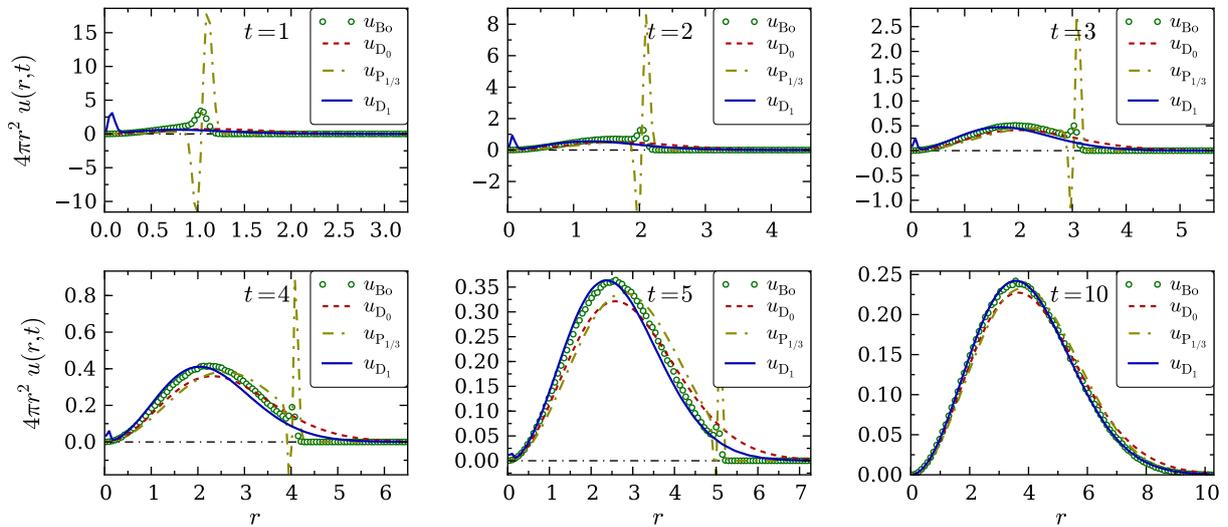


Рис. 1. Диффузионное,  $P_{1/3}$  и  $D_1$  приближения в сравнении с решением задачи Коши для линейного уравнения Больцмана.

**Глава 3. Методы численного решения задач переноса излучения в областях с зеркальными границами.** Построены квадратурные схемы метода дискретных ординат («дискретных» направлений), использующие квазилинейную интерполяцию на единичной сфере, и разработаны схемы численного решения осесимметричных задач переноса излучения в областях с зеркальными непрозрачными и прозрачными границами, основанные на методе характеристик.

В разделе 3.1 построены квадратурные схемы, которые используют квазилинейную интерполяцию на единичной сфере  $S^2$  [1]. Эти схемы дают квадратурные формулы на сфере для вычисления интеграла рассеяния и объемной плотности энергии излучения, и квадратурные формулы на полусферах для вычисления потока излучения на границах. Благодаря аналитическому представлению угловой зависимости, формулировка граничных условий в случае зеркального отражения и преломления на границе становится простой.

Принципиальной проблемой в методе дискретных ординат является построение квадратур на сфере. Основной принцип построения квадратур был сформулирован

С. Л. Соболевым: если область интегрирования инвариантна относительно некоторой группы преобразований, то квадратура должна быть инвариантна относительно этой же группы. В случае метода дискретных ординат естественно строить квадратуры, инвариантные относительно группы  $G_{VIII}^*$  — группы симметрии октаэдра.

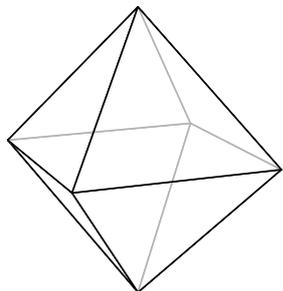


Рис. 2. Октаэдр.

Квадратуры, используемые в методе дискретных ординат, не предполагают какого-либо аналитического представления интегрируемой функции, поэтому, для того, чтобы решать задачи переноса излучения с зеркальными границами, нужны квадратуры, которые предоставляли бы возможности для интерполяции на сфере. Простейшая интерполяция — кусочно-линейная. На плоскости такая интерполяция может быть легко реализована. На сфере, однако, кусочно-линейные функции не могут быть определены. Тем не менее, можно определить на сфере кусочно-квазилинейные функции.

Для этого необходимо построить такие триангуляции сферы, чтобы узловые точки были распределены по сфере как можно более равномерно.

С. Л. Соболевым были построены квадратуры Ньютона–Котеса на сфере, инвариантные относительно группы  $G_{VIII}^*$ . В этих квадратурах узловые точки образуют сетки двух типов, которые связаны с двумя типами триангуляции на сфере. Триангуляция и соответствующая сетка на сфере получается проецированием таковых с октаэдра на сферу. Примеры триангуляций обоих типов на грани октаэдра даны на рис. 3, 4. Квазилинейная интерполяция, основанная на этих триангуляциях, может быть реализована следующим образом. Строится многогранник, вписанный в сферу, вершины которого совпадают с вершинами сферических треугольников. Пусть  $(x_\Omega, y_\Omega, z_\Omega)$  — радиальная проекция точки  $\Omega \in \mathbb{S}^2$  на многогранник. Непрерывная функция, заданная на сфере  $\mathbb{S}^2$ , называется квазилинейной, если она линейна в координатах  $(x_\Omega, y_\Omega, z_\Omega)$  на каждой грани многогранника. В результате квазилинейная интерполяция на сфере сводится к линейной интерполяции на гранях многогранника. Квадратурные веса вычисляются естественным образом, хотя и трудоемко.

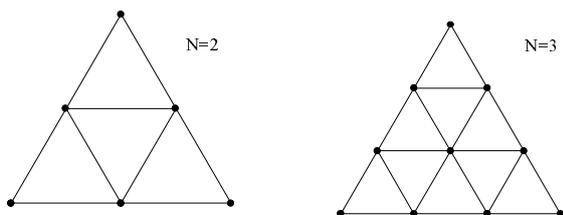


Рис. 3. Примеры триангуляции первого типа на грани октаэдра,  $N = 2, 3$ .

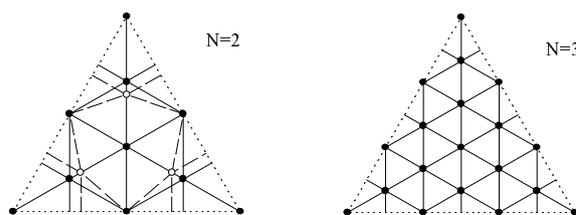


Рис. 4. Примеры триангуляции второго типа на грани октаэдра,  $N = 2, 3$ .

В разделе 3.2 выведено уравнение переноса излучения в осесимметричном случае и выведены различные граничные условия для него: для непрозрачных и прозрачных, диффузных и зеркальных границ [2, 6]. При этом уравнение переноса и граничные условия записаны не в цилиндрических, а в декартовых координатах, в которых характеристики уравнения переноса — прямые линии.

В декартовых координатах перенос излучения в сером приближении (без спек-

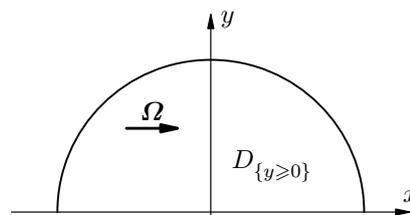


Рис. 5. Учет осевой симметрии.

тральной зависимости) описывается стационарным уравнением переноса излучения

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I + \beta I \equiv \Omega_x \partial_x I + \Omega_y \partial_y I + \Omega_z \partial_z I + \beta I = \sigma_s \mathcal{S}I + \kappa I_b,$$

где  $I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$  — интенсивность излучения,  $\boldsymbol{\Omega} \equiv (\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z) = (\sin \theta \cos \varphi_\Omega, \sin \theta \sin \varphi_\Omega, \cos \theta)$  — направление излучения,  $\kappa, \sigma_s, \beta = \kappa + \sigma_s$  — коэффициенты поглощения, рассеяния, ослабления, соответственно,  $\mathcal{S}I(\mathbf{r})$  — интеграл рассеяния,  $I_b(\mathbf{r})$  — интенсивность излучения черного тела.

В случае осевой симметрии (вокруг оси  $z$ ) решение уравнения переноса достаточно искать в половине  $\{y \geq 0\}$  трехмерной осесимметричной области  $D$  и только для направлений  $\boldsymbol{\Omega} = (\sin \theta, 0, \cos \theta)$ , см. рис. 5. В результате уравнение переноса принимает вид

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I + \beta I \equiv \sin \theta \partial_x I + \cos \theta \partial_z I + \beta I = \sigma_s \mathcal{S}I + \kappa I_b,$$

где  $I \equiv I(\mathbf{r}, \theta)$ .

На непрозрачной зеркально отражающей границе условие имеет вид

$$I(\mathbf{r}, \theta) = \rho_s I(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\theta}) + (1 - \rho_s) I_{b,s}, \quad \Omega_n < 0,$$

где  $\rho_s$  — коэффициент зеркального отражения для неполяризованного излучения,  $\hat{\theta}$  — полярный угол направления  $\hat{\boldsymbol{\Omega}}$  луча, падающего на границу, и зеркально отраженного в направлении  $\boldsymbol{\Omega}$ , задаваемом полярным углом  $\theta$ . Вообще говоря, луч падает на границу и отражается от нее в одной и той же точке, и вектора  $\boldsymbol{\Omega}$  и  $\hat{\boldsymbol{\Omega}}$  связаны законом зеркального отражения  $\hat{\boldsymbol{\Omega}} = \boldsymbol{\Omega} - 2\Omega_n \mathbf{n}$ , где  $\Omega_n = \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n}$ ,  $\mathbf{n}$  — нормаль к границе в этой точке. Однако в принятом способе интерпретации осевой симметрии точка  $\hat{\mathbf{r}}$  падения луча в направлении  $\hat{\boldsymbol{\Omega}}$  на поверхность и точка  $\mathbf{r}$  отражения луча в граничном условии отличаются, см. рис. 6.

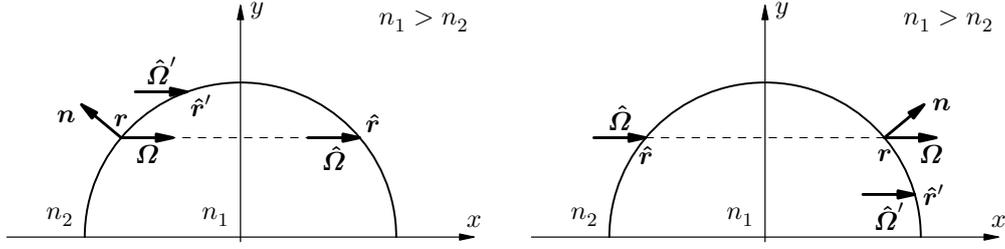
На прозрачной зеркальной границе раздела между двумя средами с показателями преломления  $n_1$  и  $n_2$  граничные условия имеют вид

$$I^{\text{out}}(\mathbf{r}, \theta) = \rho_{s,n}(\alpha) I^{\text{inc}}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\theta}) + [1 - \rho_{s,n}(\alpha)] n^2 I^{\text{inc}}(\hat{\mathbf{r}}', \hat{\theta}'), \quad \Omega_n < 0,$$

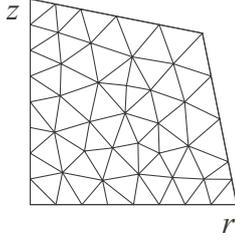
$$I^{\text{out}}(\mathbf{r}, \theta) = \rho_{s,1/n}(\alpha) I^{\text{inc}}(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\theta}) + [1 - \rho_{s,1/n}(\alpha)] n^{-2} I^{\text{inc}}(\hat{\mathbf{r}}', \hat{\theta}'), \quad \Omega_n > 0,$$

где  $\hat{\theta}'$  — полярный угол направления  $\hat{\boldsymbol{\Omega}}'$  луча, падающего на границу и преломленного в направлении  $\boldsymbol{\Omega}$ , задаваемом полярным углом  $\theta$ ,  $\rho_{s,n}(\alpha)$  — коэффициент зеркального отражения для неполяризованного излучения (выражается формулой Френеля),  $n = n_1/n_2$  — относительный коэффициент преломления,  $\alpha = \arccos(|\Omega_n|)$ ,  $\Omega_n = \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n}$ . Вообще говоря, луч падает на границу и преломляется от нее в одной и той же точке, и вектора  $\boldsymbol{\Omega}$  и  $\hat{\boldsymbol{\Omega}}'$  связаны законом преломления (законом Снеллиуса)  $\mathbf{n} \times (n_1 \boldsymbol{\Omega} - n_2 \hat{\boldsymbol{\Omega}}') = 0$ , где  $\mathbf{n}$  — внешняя по отношению к среде 1 нормаль к границе раздела сред. Однако в принятом способе интерпретации осевой симметрии точка  $\hat{\mathbf{r}}'$  падения луча в направлении  $\hat{\boldsymbol{\Omega}}'$  на поверхность и точка  $\mathbf{r}$  преломления луча в граничных условиях отличаются, см. рис. 6.

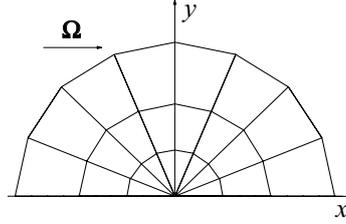
**В разделе 3.3** представлена упрощенная численная схема решения осесимметричных задач переноса излучения [2]. В этой схеме цилиндрические и конические грани ячеек, на которые разбивается пространственная область, заменяются на плоские, см. рис. 7, 8, 9. В противном случае характеристика могла бы пересекать одну и ту же неплоскую грань ячейки дважды. Такое «разбиение» пространственной области упрощает применение метода характеристик, но, как показывают тестовые задачи, обеспечивает достаточную во многих случаях точность численных решений.



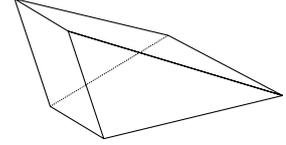
**Рис. 6.** Иллюстрация зеркального отражения и преломления на вертикальной прозрачной зеркальной границе раздела сред с учетом осевой симметрии.



**Рис. 7.** Пример триангуляции сечения осесимметричной области в координатах  $r = \sqrt{x^2 + y^2}$ ,  $z$ .



**Рис. 8.** Сечение типичного разбиения в плоскости  $x, y$ . Число секторов равно  $N_\varphi$ .



**Рис. 9.** Типичная ячейка.

В качестве «дискретных» направлений выбираются  $\Omega_j = (\sin \theta_j, 0, \cos \theta_j)$ ,  $j = 1, \dots, N_\theta$ , где  $\cos \theta_j$  равномерно распределены на интервале  $(-1, 1)$ .

Пространственная дискретизация уравнения переноса осуществляется так же, как в методе дискретных ординат. При помощи интегрирования уравнения переноса по ячейке  $n$  и использования формулы Гаусса-Остроградского получается соотношение

$$\Omega_j \cdot \sum_{k \in \Xi_n} \mathbf{n}_{kn} S_k I_{kj}^{\text{inc, out}} + \beta V_n I_{nj} = V_n F_n, \quad (4)$$

где  $\Xi_n$  — множество граней ячейки  $n$ ,  $\mathbf{n}_{kn}$  — нормаль к грани  $k$ , внешняя по отношению к ячейке  $n$ ,  $S_k$  — площадь грани  $k$ ,  $I_{kj}^{\text{inc, out}}$  — средняя интенсивность излучения в направлении  $\Omega_j$ , падающего (incident) на грань  $k$  и излучаемого (outgoing) этой гранью, соответственно,  $V_n$  — объем ячейки  $n$ ,  $I_{nj}$  — средняя интенсивность излучения в направлении  $\Omega_j$  в ячейке  $n$ ,  $F_n$  — среднее значение  $F \equiv \sigma_s S I + \kappa I_b$  в ячейке  $n$ , которое вычисляется по формуле

$$F_n = \sigma_s S_n + \kappa I_{b, n}, \quad (5)$$

среднее значение интеграла рассеяния в ячейке  $n$  вычисляется по формуле

$$S_n = (2\pi)^{-1} \sum_{j=1}^{N_\theta} w_j \sum_{m \in \Delta_n} I_{mj}, \quad (6)$$

$w_j$  — квадратурные веса,  $\Delta_n$  — множество ячеек, которые могут быть совмещены с ячейкой  $n$  вращением вокруг оси  $z$ ,  $I_{b, n}$  — среднее значение интенсивности черного тела в ячейке  $n$ .

Уравнение (4) связывает среднюю интенсивность в ячейке  $I_{nj}$  со средними интенсивностями на ее гранях  $I_{kj}^{\text{inc, out}}$  ( $j$  фиксировано,  $F_n$  задано). Для однозначного определения интенсивностей требуются дополнительные соотношения между ними. В методе дискретных ординат существуют различные способы задания таких соотношений, но использование большинства из них для ячеек нерегулярной формы проблематично. В диссертации применяется метод характеристик.

При помощи интегрирования уравнения переноса вдоль характеристик, параллельных направлениям  $\Omega_j$ , и усреднения интенсивности излучения на гранях ячеек, получается соотношение между интенсивностями на гранях

$$I_{kj}^{\text{inc}} = \sum_{l \in \Xi_{nj}} c_{klj} I_{lj}^{\text{out}} + d_{kj} F_n, \quad (7)$$

где  $k = 1, \dots, N_f$ ,  $j = 1, \dots, N_\theta$ ,  $N_f$  — общее число граней, суммирование ведется по множеству  $\Xi_{nj}$  граней ячейки  $n$ , излучающих в направлении  $\Omega_j$ , коэффициенты  $c_{klj}$ ,  $d_{kj}$  вычисляются (несложно, хотя и трудоемко) аналитически (некоторые из коэффициентов  $c_{klj}$  могут быть равны нулю, если излучение с грани  $l$  в направлении  $\Omega_j$  не попадает на грань  $k$ ).

Если грань  $k$  не принадлежит границе двух сред с различными показателями преломления, то

$$I_{kj}^{\text{out}} = I_{kj}^{\text{inc}}. \quad (8)$$

Уравнения для интенсивностей дополняются «дискретными» граничными условиями.

#### Алгоритм численного решения:

- 1: **if** ( $\sigma_s > 0$  {среда рассеивающая}) **then**
- 2:     задается начальное приближение для средних интенсивностей  $I_{nj}$  в ячейках
- 3: **end if**
- 4: **while** ( $(\sigma_s = 0)$  **or** (нет сходимости по интенсивностям  $I_{nj}$ )) **do**
- 5:     вычисляются средние значения  $F_n$  правой части уравнения переноса по формулам (5), (6)
- 6:     задается начальное приближение для средних интенсивностей  $I_{kj}^{\text{out}}$  на гранях
- 7:     **while** (нет сходимости по интенсивностям  $I_{kj}^{\text{inc,out}}$ ) **do**
- 8:         вычисляется следующее приближение для интенсивностей  $I_{kj}^{\text{inc,out}}$  на гранях ячеек при помощи формул (7), (8) и граничных условий
- 9:     **end while**
- 10:     **return** интенсивности  $I_{kj}^{\text{inc,out}}$
- 11:     вычисляется следующее приближение для интенсивностей  $I_{nj}$  в ячейках по формуле (4)
- 12:     **if** ( $\sigma_s = 0$  {рассеяние отсутствует}) **then**
- 13:         **stop**
- 14:     **end if**
- 15: **end while**
- 16: **return** интенсивности  $I_{kj}^{\text{inc,out}}$ ,  $I_{nj}$

В этом алгоритме во внешнем цикле (выполняется, если среда рассеивающая) находятся интенсивности  $I_{nj}$  в ячейках. Во внутреннем цикле находятся интенсивности  $I_{kj}^{\text{inc,out}}$  на гранях при заданных значениях  $F_n$  правой части уравнения переноса.

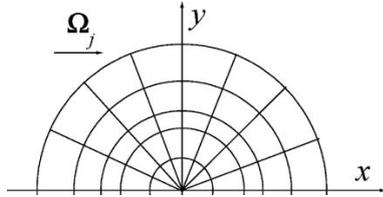
**Тестовая задача.** (Одна из нескольких тестовых задач.) Вычисляется эффективный коэффициент черноты цилиндрической полости с зеркальными стенками и открытой верхней границей. Высота цилиндра равна  $L$ , радиус равен  $R$ . Среда внутри цилиндра прозрачная. Все стенки, кроме открытой верхней границы, непрозрачные зеркальные с постоянным коэффициентом зеркального отражения  $\rho_s$  и холодные ( $T_s = 0$ ). Эффективный коэффициент черноты полости определяется следующим образом. На верхней границе задается условие  $I = I_{b,s}$ ,  $\Omega_n < 0$ . В результате решения задачи вычисляется средний поток излучения  $\bar{q}^{\text{inc}}$ , падающий на верхнюю границу. Эффективный коэффициент черноты полости равен  $\varepsilon_{\text{eff}} = 1 - \bar{q}^{\text{inc}}/q_{b,s}$ ,  $q_{b,s} = \pi I_{b,s}$ ,

$0 \leq \varepsilon_{\text{eff}} \leq 1$ . Вычисленные коэффициенты черноты для различных значений  $L/R$  и  $\rho_s$  представлены в таблице 1. Вычисленные коэффициенты совпадают с точными.

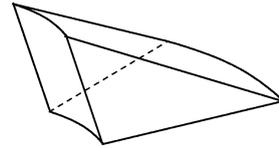
**Таблица 1.** Эффективный коэффициент  $\varepsilon_{\text{eff}}$  черноты цилиндрической полости.

$L/R$	$N_{rz} \times N_\varphi \times N_\theta$	$\rho_s = 0.1$	$\rho_s = 0.5$	$\rho_s = 0.9$
1	$4 \times 8 \times 8$	0.978	0.779	0.253
2	$8 \times 8 \times 8$	0.994	0.883	0.362
3	$12 \times 8 \times 8$	0.998	0.932	0.446
4	$16 \times 8 \times 8$	0.999	0.958	0.514

В разделе 3.4 представлена численная схема [6], которая отличается от упрощенной тем, что в ней пространственные ячейки остаются без изменений, см. рис. 10, 11. Дискретизация уравнения переноса в этой схеме осуществляется аналогично его дискретизации в упрощенной схеме. Различие вызвано тем, что теперь грани ячеек могут иметь коническую или цилиндрическую форму, и поэтому характеристика может пересекать одну и ту же грань дважды. В этом случае грань ячейки разбивается на две части: первая испускает излучение, на вторую излучение падает. Эти части граней рассматриваются как разные грани. Отметим, что различные направления  $\Omega_j$  делят одну и ту же грань различным образом, или не делят ее совсем. Уравнения (4)–(8) по форме не отличаются, но теперь множество граней, вообще говоря, другое, поскольку одна и та же неплоская грань может разбиваться на две, одна из которых испускает, а вторая принимает излучение. Кроме того, теперь из-за более сложной формы граней коэффициенты  $c_{klj}$ ,  $d_{kj}$  в уравнении (7) не могут быть вычислены аналитически, и их требуется находить численно. В результате точность получаемых численных решений повышается. Алгоритм численного решения не отличается от такового в упрощенной схеме.



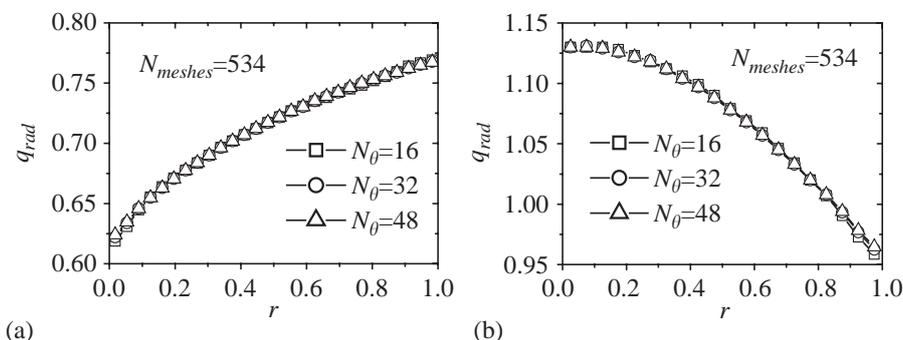
**Рис. 10.** Сечение типичного разбиения в плоскости  $x, y$ . Число секторов равно  $N_{\varphi, j}$ .



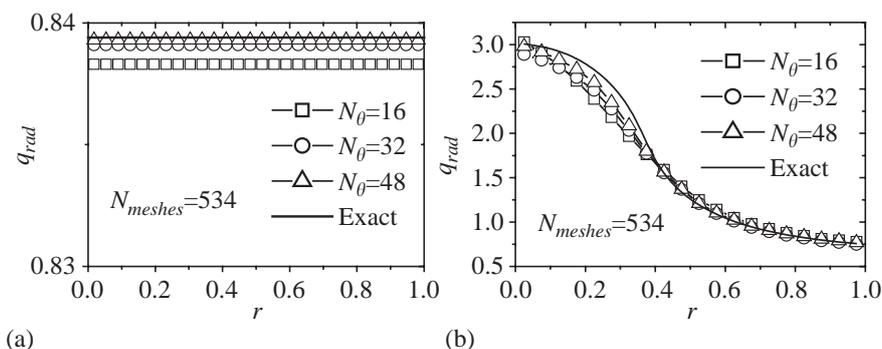
**Рис. 11.** Типичная ячейка.

**Тестовые задачи 1, 2.** (Две из нескольких тестовых задач.) Перенос теплового излучения в конусе, содержащем серую прозрачную среду ( $\kappa = 0$ ,  $I_b = 0$ ,  $\sigma_s = 0$ ). Радиус основания конуса равен  $R = 1$ , высота равна  $Z = 1$ . Основание конуса излучает с постоянной интенсивностью  $I_{b,s} = 4/\pi$ , оно непрозрачное и черное ( $\rho_d = 0$ ). Окружающая конус среда прозрачна. В задаче 1 боковая поверхность конуса — прозрачная диффузная граница раздела сред с коэффициентом диффузного отражения изнутри, равном  $\rho_{d,1} = 0.8$ , коэффициент диффузного отражения снаружи равен  $\rho_{d,2} = 0.2$ . В задаче 2 боковая поверхность конуса — прозрачная зеркальная граница раздела сред, показатель преломления среды в конусе равен  $n_1 = 2$ , окружающей среды —  $n_2 = 1$ . Распределения результирующих потоков теплового излучения на боковой поверхности конуса и его основании в задачах 1, 2 представлены на рис. 12, 13.

Точные (аналитические) решения задачи 2 получены в [7]. Прозрачные зеркальные границы раздела сред приводят к заметно большей ошибке в численном решении. Эта ошибка вызвана ложной диффузией из-за фактически разрывного коэффициента зеркального отражения в окрестности критического угла.



**Рис. 12.** Диффузная граница раздела сред. Вычисленные распределения результирующих потоков теплового излучения на боковой поверхности конуса (а) и его основании (б).  $N_{\text{meshes}} \equiv N_{r_z}$  — количество ячеек триангуляции сечения  $D_{r_z}$ .



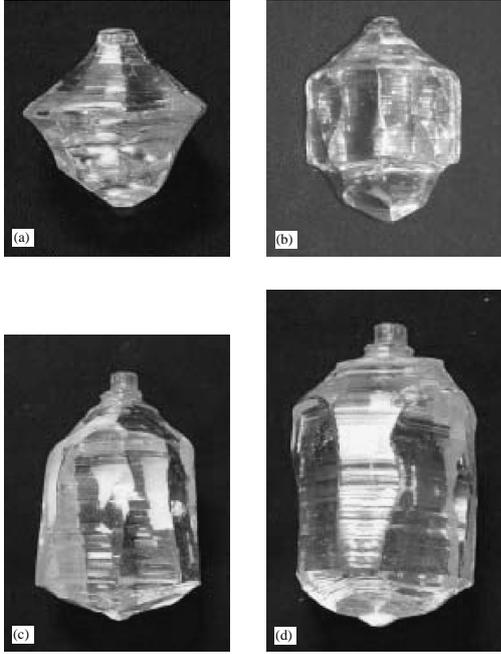
**Рис. 13.** Зеркальная граница раздела сред. Точные и вычисленные распределения результирующих потоков теплового излучения на боковой поверхности конуса (а) и его основании (б).

Предложена модификация [8] численной схемы, которая исправляет недостатки описанных выше схем, которые могут приводить к значительным ошибкам в решениях при решении задач переноса излучения в областях с зеркальными границами.

**В разделе 3.5** описано применение разработанных численных методов при моделировании роста полупрозрачных кристаллов из расплава [3–5].

В процессе роста кристалла  $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$  из расплава низкоградиентным методом Чохральского на начальном этапе роста кристалла фронт кристаллизации был сильно выгнут в расплав, при этом качество кристалла было неудовлетворительно, позднее фронт кристаллизации становился более плоским, и качество кристалла становилось хорошим, см. рис. 14. Требовалось построить математическую модель, объясняющую такой рост. На основе описанных в этой главе методов был разработан комплекс программ решения осесимметричных задач переноса излучения, который был встроен в программный комплекс моделирования сложного тепло- и массообмена [4, 5]. Результаты моделирования, см. рис. 15, показали, что такая форма фронта кристаллизации вызвана прозрачной зеркальной границей между кристаллом и га-

ЗОМ [5].



**Рис. 14.** Эволюция фронта кристаллизации в процессе роста кристалла  $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$  [5].

#### Глава 4. Оптимизация граничных значений и формы области в задачах переноса излучения.

В разделе 4.1 рассматриваются задачи оптимального проектирования граничных значений для уравнения переноса излучения [9, 10].

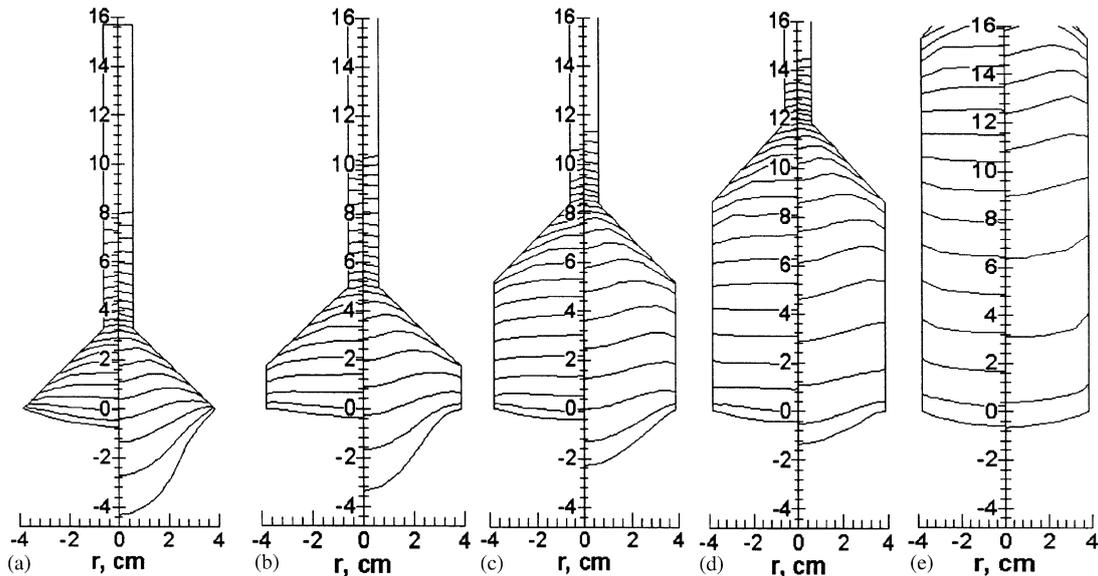
Рассматривается стационарный перенос теплового излучения в трехмерной области  $D$ , содержащей серую (то есть без спектральной зависимости) поглощающую и излучающую среду (рассеянием для простоты пренебрегаем). В этом случае перенос излучения описывается стационарным уравнением переноса излучения

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I + \kappa I = \kappa I_b. \quad (9)$$

Граница области состоит из поверхности нагревателя (heater)  $S_h$ , нагреваемой поверхности (design surface)  $S_d$  и свободной от оптимизации поверхности (free)  $S_f$ . Все поверхности серые и диффузно отражающие. В этом случае граничные условия на всех поверхностях имеют вид

$$I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = (1 - \varepsilon)q^{\text{inc}}(\mathbf{r})/\pi + \varepsilon I_{b,s}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in S_h \cup S_d \cup S_f, \quad \Omega_n < 0,$$

где  $q^{\text{inc}}(\mathbf{r}) = \int_{\Omega'_n > 0} \Omega'_n I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\Omega'$  — поток теплового излучения, падающий на поверхность,  $\varepsilon$  — коэффициент черноты поверхности,  $\Omega_n = \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n}$ ,  $\mathbf{n}$  — внешняя нормаль



**Рис. 15.** Численное моделирование эволюции фронта кристаллизации и температурного поля в процессе роста кристалла  $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$  [5]. На каждом рисунке слева — диффузная прозрачная граница кристалла и газа (форма фронта неправильная), справа — зеркальная прозрачная граница кристалла и газа (форма фронта правильная).

к поверхности,  $I_{b,s}$  — интенсивность черного тела на поверхности. Диффузно отражающие границы рассматриваются здесь лишь для простоты. Включение в граничные условия зеркального отражения не представляет сложностей.

Предполагаются известными все свойства среды и поверхностей, то есть все коэффициенты и параметры, входящие в уравнение переноса излучения и граничные условия.

В прямой задаче требуется найти интенсивность излучения, если известно распределение температуры внутри и на границе области. Прямая задача математически корректна. После того, как прямая задача решена, могут быть найдены, например, тепловые потоки на границах.

Предположим теперь, что на нагреваемой поверхности задана не только температура, но и желаемое распределение теплового потока, и требуется найти температуру на поверхности нагревателя, которая обеспечивала бы такое распределение теплового потока. Задача оптимального проектирования формулируется следующим образом: пусть температуры на нагреваемой и свободной от оптимизации поверхностях заданы, требуется найти такое распределение температуры на поверхности нагревателя, которое обеспечивало бы заданное распределение теплового потока на нагреваемой поверхности.

Задача оптимального проектирования может быть поставлена в операторном виде. Обозначим коэффициенты черноты поверхности нагревателя, нагреваемой и свободной от оптимизации поверхностями символами  $\varepsilon_h$ ,  $\varepsilon_d$  и  $\varepsilon_f$ , соответственно. Введем поток черного тела на поверхности нагревателя  $q_h(\mathbf{r}) = \pi I_{b,s}(\mathbf{r})$ ,  $\mathbf{r} \in S_h$ . Граничные условия принимают вид

$$I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = [(1 - \varepsilon_h)q^{\text{inc}}(\mathbf{r}) + \varepsilon_h q_h(\mathbf{r})] / \pi, \quad \mathbf{r} \in S_h, \quad \Omega_n < 0, \quad (10a)$$

$$I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = (1 - \varepsilon_d)q^{\text{inc}}(\mathbf{r}) / \pi + \varepsilon_d I_{b,s}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in S_d, \quad \Omega_n < 0, \quad (10b)$$

$$I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = (1 - \varepsilon_f)q^{\text{inc}}(\mathbf{r}) / \pi + \varepsilon_f I_{b,s}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in S_f, \quad \Omega_n < 0. \quad (10c)$$

Определим оператор  $A$  — оператор прямой задачи — соотношением  $A(q_h) = q_d$ , где  $q_d(\mathbf{r}) = \varepsilon_d q^{\text{inc}}(\mathbf{r})$ ,  $\mathbf{r} \in S_d$ , — поток теплового излучения, поглощенный нагреваемой поверхностью. Оператор  $A$  вычисляется в результате решения прямой задачи для уравнения переноса (9) с граничными условиями (10).

Задача оптимального проектирования формулируется во введенных обозначениях как обратная задача: дан тепловой поток  $q_d$ , найти тепловой поток  $q_h$ . Главная проблема поставленной обратной задачи заключается не в обращении оператора  $A$ , а в том, что она математически некорректна, то есть решение  $q_h$  неустойчиво относительно возмущений в исходных данных  $q_d$ .

Обратная задача может быть сформулирована как задача минимизации: найти решение  $q_h$ , минимизирующее целевой функционал

$$J(q_h) = \|A(q_h) - q_d\|_{L_2(S_d)}^2,$$

где  $\|u\|_{L_2(S_d)}^2 = \int_{S_d} |u(s)|^2 ds$ . Задача минимизации также некорректна.

Для решения обратной задачи используются вариационные методы регуляризации, а именно, метод регуляризации Тихонова, итерационную регуляризацию и параметрическую регуляризацию, поскольку они позволяют учитывать разнообразную априорную информацию об искомом решении.

Метод регуляризации Тихонова заключается в минимизации сглаживающего функционала  $T^\alpha(q_h) \equiv J(q_h) + \alpha \Omega(q_h) \rightarrow \min_{q_h}$ , где  $\alpha > 0$  — параметр регуляризации,

$\Omega$  — стабилизирующий функционал нулевого или первого порядка, соответственно:  $\Omega(q_h) = \int_{S_h} q_h^2(s) ds$  или  $\Omega(q_h) = \int_{S_h} \{q_h^2(s) + [q_h'(s)]^2\} ds$ .

Итерационная регуляризация заключается последовательной минимизации целевого функционала градиентным методом:  $J(q_h) \rightarrow \min_{q_h}$ , при этом правило остановки процесса минимизации выбирается в соответствии с принципом невязки. Итерационный процесс может быть построен на основе таких градиентных методов как метод наискорейшего спуска или метод сопряженных градиентов, причем последний, вообще говоря, значительно эффективнее первого. Однако последний не позволяет, вообще говоря, учитывать нетривиальные ограничения. Поэтому используется метод наискорейшего спуска.

Параметрическая регуляризация основана на представлении искомой функции в параметрическом виде конечным числом параметров  $q_h(\mathbf{r}) = q_{\boldsymbol{\theta}}(\mathbf{r})$ , где  $\boldsymbol{\theta} = (\theta_1, \dots, \theta_p)$  — параметры, и заключается в решении задачи минимизации  $\hat{J}(\boldsymbol{\theta}) \rightarrow \min_{\boldsymbol{\theta} \in \Theta}$ , где

$$\hat{J}(\boldsymbol{\theta}) = \left\| \hat{A}(\boldsymbol{\theta}) - q_d \right\|_{L_2(S_d)}^2,$$

$\hat{A}(\boldsymbol{\theta}) = A(q_{\boldsymbol{\theta}})$ ,  $\Theta$  — ограниченное множество в  $\mathbb{R}^p$ .

Для решения задач минимизации используются градиентные методы. Поэтому ключевым пунктом в предлагаемом подходе является нахождение градиента функционалов  $J$  и  $\hat{J}$ .

Градиент функционала  $J$  имеет вид

$$J'(q_h) = 2(A')^* [A(q_h) - q_d],$$

где  $(A')^*$  — оператор, сопряженный к оператору  $A'$ , производной Фреше оператора  $A$ . Оператор  $A'$  определяется соотношением  $A'q_h = \tilde{q}_d$ , где поток  $\tilde{q}_d(\mathbf{r}) = \varepsilon_d q^{\text{inc}}(\mathbf{r})$ ,  $\mathbf{r} \in S_d$ , находится в результате решения так называемой инфинитезимальной задачи (sensitivity problem). Сопряженный оператор  $(A')^*$  задается равенством

$$(A')^* \tilde{q}_d = q_h^*,$$

где поток

$$q_h^*(\mathbf{r}) = \varepsilon_h q^{*,\text{inc}}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in S_h, \quad (11)$$

находится в результате решения сопряженной задачи, которая состоит из уравнения

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I^* + \kappa I^* = 0,$$

и граничных условий

$$\begin{aligned} I^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) &= (1 - \varepsilon_h) q^{*,\text{inc}}(\mathbf{r}) / \pi, & \mathbf{r} \in S_h, \quad \Omega_n < 0, \\ I^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) &= [(1 - \varepsilon_d) q^{*,\text{inc}}(\mathbf{r}) + \varepsilon_d \tilde{q}_d(\mathbf{r})] / \pi, & \mathbf{r} \in S_d, \quad \Omega_n < 0, \\ I^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) &= (1 - \varepsilon_f) q^{*,\text{inc}}(\mathbf{r}) / \pi, & \mathbf{r} \in S_f, \quad \Omega_n < 0, \end{aligned}$$

$q^{*,\text{inc}}(\mathbf{r}) = \int_{\Omega'_n > 0} \Omega'_n I^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}'$  — поток излучения, падающий на границу.

Градиент функционала  $\hat{J}$  имеет вид

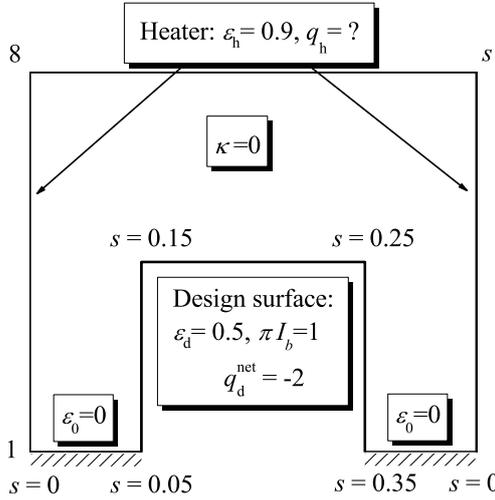
$$\hat{J}'(\boldsymbol{\theta}) = 2 \left[ \hat{A}'(\boldsymbol{\theta}) \right]^* \left[ \hat{A}(\boldsymbol{\theta}) - q_d \right].$$

Линейный оператор  $\hat{A}'(\boldsymbol{\theta})$  это производная Фреше оператора  $\hat{A}$  в точке  $\boldsymbol{\theta}$ . Сопряженный оператор  $[\hat{A}'(\boldsymbol{\theta})]^*$  определяется равенством

$$\left[ \hat{A}'(\boldsymbol{\theta}) \right]^* \tilde{q}_d = \left( \left( \frac{\partial q_{\boldsymbol{\theta}}}{\partial \theta_1}, q_h^* \right)_{L_2(S_h)} \quad \dots \quad \left( \frac{\partial q_{\boldsymbol{\theta}}}{\partial \theta_p}, q_h^* \right)_{L_2(S_h)} \right)^T,$$

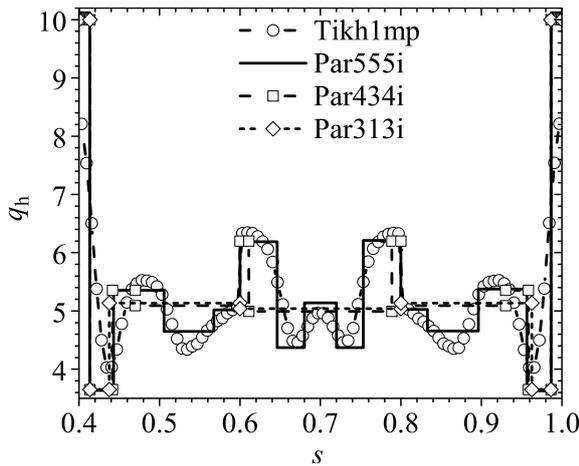
где поток  $q_h^*$  определяется по формуле (11).

**Тестовая задача.** (Одна из нескольких тестовых задач.) Перенос теплового излучения в «двухмерной» области, см. рис. 16, заполненной прозрачной средой ( $\kappa = 0$ ). Коэффициенты черноты поверхностей:  $\varepsilon_h = 0.9$ ,  $\varepsilon_d = 0.5$ ,  $\varepsilon_f = 0$ . Поток черного тела на нагреваемой поверхности равен  $\pi I_{b,s} = 1$ . Требуется найти поток теплового излучения  $q_h(s)$  на поверхности нагревателя, при котором результирующий тепловой поток на нагреваемой поверхности равен  $q_d^{\text{net}}(s) \equiv \varepsilon_d[\pi I_{b,s} - q_d^{\text{inc}}(s)] = -2$ .

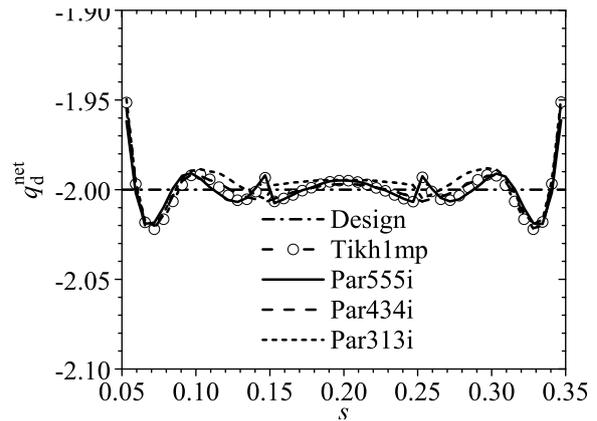


**Рис. 16.** Тестовая задача. (Свободная от оптимизации поверхность имеет индекс 0.)

На границе области задается параметр  $s$  так, что поверхность нагревателя  $S_h = (0.4, 1)$ , нагреваемая поверхность  $S_d = (0.05, 0.35)$ , свободная от оптимизации поверхность  $S_f = (0, 0.05) \cup (0.35, 0.4)$ , см. рис. 16. На рис. 17 показано решение задачи, полученное модифицированной регуляризацией Тихонова первого порядка с ограничением  $q_h^{\text{net}} \equiv \varepsilon_h[\pi I_{b,s} - q_h^{\text{inc}}(s)] \geq 0$ . Модификация заключается в том, что стабилизирующий функционал представляется в виде суммы интегралов по интервалам  $(0.4, 0.6)$ ,  $(0.6, 0.8)$ ,  $(0.8, 1)$ . Основываясь на этом решении, можно сделать заключение о возможных кусочно-постоянных решениях: число интервалов, начальные приближения для параметров. На рис. 17 показаны также кусочно-постоянные решения, полученные параметрической регуляризацией с ограничением  $q_h^{\text{net}} \geq 0$ : Par555i – по 5 интервалов на каждом из трех сегментов поверхности нагревателя, Par434i – 4 + 3 + 4 интервалов, Par313i – 3 + 1 + 3 интервалов (точки разрыва внутри сегментов – параметры).



**Рис. 17.** Распределения теплового потока  $q_h$  на поверхности нагревателя.



**Рис. 18.** Распределения суммарного теплового потока  $q_d^{\text{net}} \equiv \varepsilon_d[\pi I_{b,s} - q_d^{\text{inc}}(s)]$  на нагреваемой поверхности.

Представленные результаты иллюстрируют принципиальное отличие обратных задач оптимального проектирования от обратных задач идентификации параметров. В рассматриваемых задачах имеется свобода в выборе решения, наиболее подходя-

шего с инженерной точки зрения, при этом цель проектирования  $q_d^{\text{net}}$  изменяется незначительно.

Полученные решения были сопоставлены с решениями этой же задачи, но без ограничения  $q_h^{\text{net}} \geq 0$ . Оказалось, что решения без ограничений дают практически такие же распределения суммарного теплового потока  $q_d^{\text{net}}$  на нагреваемой поверхности, как и решения с ограничением  $q_h^{\text{net}} \geq 0$ .

Важным и обширным классом задач оптимизации являются задачи оптимального проектирования граничных значений для уравнения переноса излучения в осесимметричных задачах, так как многие высокотемпературные установки (системы) имеют осевую симметрию или могут с высокой степенью точности рассматриваться как осесимметричные. В статье [10] рассматриваются задачи, аналогичные или близкие к тем, которые изучались в декартовых координатах. Эти задачи отражают некоторые особенности реальных задач. Для решения применяются те же методы, что и для задач в декартовых координатах.

Описанный подход непосредственно распространяется на задачи со сложным теплообменом. Его преимущество заключается, во-первых, в том, что регуляризации подвергается исходная обратная задача целиком, а не ее части, а, во-вторых, регуляризация осуществляется при помощи решения «прямых» задач (исходной и сопряженной). При этом сопряженная задача всегда линейна, даже если исходная прямая задача нелинейна. Прямые задачи могут быть решены любым достаточно точным и быстрым методом. Сопряженная задача может решаться той же программой (пакетом программ), что и исходная прямая. Поэтому градиент целевого функционала может быть вычислен любой доступной программой, способной обеспечить необходимую точность. Таким образом обратные задачи можно решать на той же вычислительной сетке, что и прямые.

**В разделе 4.2** рассматриваются задачи оптимизации формы области в задачах переноса излучения с диффузными и зеркальными границами [12, 14].

Рассматривается стационарный перенос теплового излучения в трехмерной области  $D$ , содержащей серую поглощающую и излучающую среду (рассеянием для простоты пренебрегаем). В этом случае перенос излучения описывается стационарным уравнением переноса излучения (9). Граница области  $D$  состоит из оптимизируемой поверхности  $S_o$ , нагреваемой поверхности  $S_d$  и свободной от оптимизации поверхности  $S_f$ . Все поверхности серые и диффузно-зеркально-отражающие. В этом случае граничные условия на всех поверхностях имеют вид

$$I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \rho_s I(\mathbf{r}, \hat{\boldsymbol{\Omega}}) + \rho_d q^{\text{inc}}(\mathbf{r})/\pi + \varepsilon I_{b,s}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in S_o \cup S_d \cup S_f, \quad \Omega_n < 0, \quad (12)$$

где  $\rho_s \equiv \rho_s(\mathbf{r})$ ,  $\rho_d \equiv \rho_d(\mathbf{r})$  и  $\varepsilon \equiv \varepsilon(\mathbf{r})$  — коэффициенты зеркального и диффузного отражения и коэффициент черноты, соответственно, причем имеет место равенство  $\rho_s + \rho_d + \varepsilon = 1$ ,  $\hat{\boldsymbol{\Omega}} = \boldsymbol{\Omega} - 2\Omega_n \mathbf{n}$  — закон зеркального отражения.

Задача оптимизации формы формулируется следующим образом: пусть заданы температуры на всех поверхностях, требуется найти форму оптимизируемой поверхности  $S_o$ , которая обеспечивала бы заданный поток теплового излучения на нагреваемой поверхности  $S_d$ . Чтобы поставить задачу формально, введем оператор  $A$  прямой задачи:

$$A(S_o) = q_d^{\text{inc}},$$

где  $q_d^{\text{inc}}(\mathbf{r}) = q^{\text{inc}}(\mathbf{r})$ ,  $\mathbf{r} \in S_d$ , — поток теплового излучения, падающий на нагреваемую поверхность. В общем случае оператор  $A$  зависит не только от формы поверхности  $S_o$ , но также и от распределения интенсивности черного тела  $I_{b,s}$  на ней.

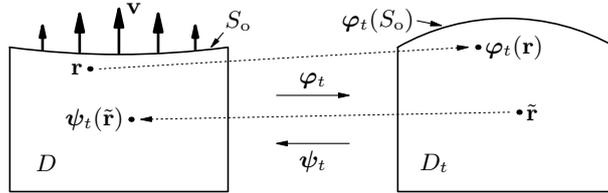
Задача геометрической оптимизации ставится во введенных обозначениях как обратная задача: пусть задан тепловой поток  $\bar{q}_d^{\text{inc}}$  на нагреваемой поверхности  $S_d$ , найти форму оптимизируемой поверхности  $S_o$  такую, что  $A(S_o) = \bar{q}_d^{\text{inc}}$ . Обратная задача может быть сведена к задаче минимизации: найти форму поверхности  $S_o$  из некоторого заданного класса, которая минимизирует целевой функционал

$$J(S_o) = \|A(S_o) - \bar{q}_d^{\text{inc}}\|_{L_2(S_d)}^2.$$

Предполагается, что нагреваемая поверхность диффузно отражающая, то есть на ней коэффициент зеркального отражения равен нулю:  $\rho_s = 0$ .

Градиентные методы минимизации требуют задания в том или ином виде градиента целевого функционала. Проблема заключается в том, что целевой функционал  $J$  зависит от поверхности  $S_o$ . Однако множество поверхностей не имеет никакой естественной структуры линейного векторного пространства, поскольку поверхности нельзя складывать как вектора, и, поэтому, обычное определение градиента не может быть использовано. Тем не менее, градиент функционала  $J$  относительно вариаций поверхности  $S_o$  может быть определен как обобщение понятия производной по направлению в рамках вариационного исчисления поверхностей (shape sensitivity analysis).

В вариационном исчислении поверхностей область  $D$  подвергается возмущению преобразованием  $\varphi_t : \mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{R}^3$ , имеющем вид  $\varphi_t(\mathbf{r}) = \mathbf{r} + t\mathbf{v}(\mathbf{r})$ , где  $\mathbf{v}$  — гладкое векторное поле (поле скоростей), определенное в окрестности области  $D$ , параметр  $t \geq 0$  достаточно мал так, что обратное преобразование  $\psi_t = \varphi_t^{-1}$  определено (см. рис. 20). В рассматриваемых задачах поле  $\mathbf{v}$  отлично от нуля только в окрестности поверхности  $S_o$ , остальные поверхности, в частности нагреваемая поверхность  $S_d$ , остаются неизменными.

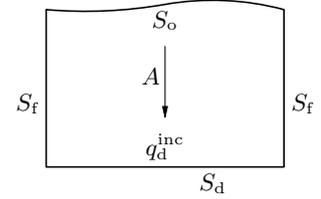


**Рис. 20.** Возмущение области  $D$ . Интенсивность  $I_t \equiv I_t(\tilde{\mathbf{r}}, \Omega)$ ,  $\tilde{\mathbf{r}} \in D_t$ , — решение прямой задачи в возмущенной области  $D_t$ . Интенсивность  $I^t \equiv I^t(\mathbf{r}, \Omega) = I_t(\varphi_t(\mathbf{r}), \Omega)$  — то же самое решение, но представленное как функция точки  $\varphi_t(\mathbf{r})$ , где  $\mathbf{r} \in D$ , то есть интенсивность  $I^t$  определена в исходной (невозмущенной) области  $D$ .

Обобщение понятия производной по направлению в вариационном исчислении поверхностей дается эйлеровой производной (Eulerian derivative) или дифференциалом (shape differential) функционала  $F(D)$  вдоль векторного поля  $\mathbf{v}$ :

$$d_{\mathbf{v}}F(D) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{t \rightarrow 0+} \frac{F(D_t) - F(D)}{t} \equiv \left. \frac{d}{dt} F(D_t) \right|_{t=0+},$$

где  $D_t = \varphi_t(D)$  — возмущенная область. Эйлерова производная  $d_{\mathbf{v}}F$  это прежде всего дифференциал функционала  $F$  относительно поля  $\mathbf{v}$  ( $d_{\mathbf{v}}F$  зависит от  $\mathbf{v}$  линейно), поэтому используется термин дифференциал.



**Рис. 19.** Оператор прямой задачи.

Целевой функционал зависит, вообще говоря, от области  $D$ . Но мы обозначаем его символом  $J(S_o)$ , чтобы подчеркнуть его зависимость от  $S_o$ .

Введем вариационную производную (shape derivative)  $I'$  интенсивности  $I$ :

$$I'(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{t \rightarrow 0+} \frac{I_t(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) - I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})}{t} \equiv \left. \frac{d}{dt} I_t(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \right|_{t=0+}, \quad \mathbf{r} \in D,$$

где интенсивность  $I_t \equiv I_t(\tilde{\mathbf{r}}, \boldsymbol{\Omega})$ ,  $\tilde{\mathbf{r}} \in D_t$ , это решение прямой задачи (9), (12), но не в исходной области  $D$ , а в возмущенной области  $D_t$ , см. рис. 20.

Дифференциал функционала  $J(S_o)$  может быть представлен в виде

$$d_v J = 2 \left( A(S_o) - \bar{q}_d^{\text{inc}}, q_d^{\prime \text{inc}} \right)_{L_2(S_d)}, \quad (13)$$

где  $q_d^{\prime \text{inc}}(\mathbf{r}) = q^{\prime \text{inc}}(\mathbf{r})$ ,  $\mathbf{r} \in S_d$ , и  $q^{\prime \text{inc}}(\mathbf{r}) = \int_{\Omega_n > 0} \Omega_n I'(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega}$ ,  $\mathbf{r} \in S$ , — падающий поток, соответствующий интенсивности  $I'$ .

Вариационная производная  $I'$  зависит от векторного поля  $\mathbf{v}$  линейно. Поэтому поток  $q_d^{\prime \text{inc}}$ , который линейно зависит от  $I'$ , может быть представлен в виде  $q_d^{\prime \text{inc}} = [A'(S_o)] \mathbf{v}_o$ , где  $\mathbf{v}_o \equiv \mathbf{v}|_{S_o}$  и  $A'(S_o)$  — линейный оператор, который отображает векторное поле  $\mathbf{v}_o$  (определенное на поверхности  $S_o$ ) в поток  $q_d^{\prime \text{inc}}$  (определенный на поверхности  $S_d$ ). Оператор  $A'(S_o)$  можно рассматривать как «производную» оператора  $A$  в «точке»  $S_o$ . Оператор  $A'(S_o)$  не может быть, вообще говоря, выражен аналитически, но он может быть выражен через вариационную производную  $I'$  и инфинитезимальную задачу (sensitivity problem). В результате получим, что

$$d_v J = (J'(S_o), \mathbf{v}_o)_{L_2(S_o)},$$

где

$$J'(S_o) = 2 [A'(S_o)]^* [A(S_o) - \bar{q}_d^{\text{inc}}],$$

$[A'(S_o)]^*$  — оператор, сопряженный к  $A'(S_o)$ . Следовательно  $J'(S_o)$  это градиент (shape gradient) функционала  $J(S_o)$ . Градиент  $J'(S_o)$  отображает поверхность  $S_o$  в векторное поле на ней же, поскольку сопряженный оператор  $[A'(S_o)]^*$  отображает поток на нагреваемой поверхности  $S_d$  в векторное поле на  $S_o$ . Это векторное поле (то есть  $J'(S_o)$ ) можно рассматривать как «направление» наискорейшего возрастания функционала  $J$  в «точке»  $S_o$ .

При выводе инфинитезимальной задачи (sensitivity problem), задающей вариационную производную  $I'$ , используется субстанциальная производная (material or Lagrangian derivative):

$$\dot{I}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{t \rightarrow 0+} \frac{I^t(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) - I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})}{t} \equiv \left. \frac{d}{dt} I^t(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \right|_{t=0+}, \quad \mathbf{r} \in D,$$

где  $I^t \equiv I^t(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = I_t(\varphi_t(\mathbf{r}), \boldsymbol{\Omega})$ ,  $\mathbf{r} \in D$  (см. рис. 20).

Вариационная и субстанциальная производные связаны соотношением

$$\dot{I} = I' + \nabla I \cdot \mathbf{v}.$$

Первый шаг при выводе градиента целевого функционала  $J'(S_o)$  — нахождение субстанциальной производной  $\dot{I}$ , которая определяется интегральным тождеством. На следующем шаге выводится вариационная производная  $I'$ , также определяемая интегральным тождеством. Вариационная производная задает оператор  $A'(S_o)$ . На заключительном шаге выводится сопряженная задача, которая задает сопряженный оператор  $[A'(S_o)]^*$ .

Сопряженный оператор  $[A'(S_o)]^*$  определяется выражением  $[A'(S_o)]^* \tilde{q}_d = \mathbf{u}_o$ , где векторное поле  $\mathbf{u}_o$  вычисляется в результате решения сопряженной задачи. Сопряженная задача состоит из уравнения

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I^* + \kappa I^* = 0, \quad \mathbf{r} \in D, \quad \boldsymbol{\Omega} \in \mathbb{S}^2, \quad (14)$$

где  $I^* \equiv I^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$ , и граничных условий

$$I^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \rho_s I^*(\mathbf{r}, \hat{\boldsymbol{\Omega}}) + \rho_d q^{*,\text{inc}}(\mathbf{r})/\pi, \quad \mathbf{r} \in S_o \cup S_f, \quad \Omega_n < 0, \quad (15a)$$

$$I^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \rho_s I^*(\mathbf{r}, \hat{\boldsymbol{\Omega}}) + \rho_d q^{*,\text{inc}}(\mathbf{r})/\pi + \tilde{q}_d(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in S_d, \quad \Omega_n < 0, \quad (15b)$$

где  $q^{*,\text{inc}}(\mathbf{r}) = \int_{\Omega_n > 0} \Omega_n I^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega}$ .

Векторное поле  $\mathbf{u}_o$  имеет вид

$$\mathbf{u}_o(\mathbf{r}) = \mathbf{u}_o^{(0)}(\mathbf{r}) + \mathbf{u}_o^{(1)}(\mathbf{r}) + \mathbf{u}_o^{(2)}(\mathbf{r}), \quad \mathbf{r} \in S_o, \quad (16)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_o^{(0)}(\mathbf{r}) = & \int_{\Omega_n > 0} \Omega_n \boldsymbol{\chi}(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega}) I^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} = \\ & - \left\{ (\nabla_\tau \rho_s) \int_{\Omega_n > 0} \Omega_n I(\mathbf{r}, -\hat{\boldsymbol{\Omega}}) I^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} + \left[ (\nabla_\tau \rho_d) \frac{q^{\text{inc}}(\mathbf{r})}{\pi} + \nabla_\tau [\varepsilon I_{b,s}(\mathbf{r})] \right] q^{*,\text{inc}} \right\} + \\ & + \int_{\Omega_n > 0} \left\{ \boldsymbol{\Omega}_\tau \cdot \nabla_\tau \left[ \rho_s I(\mathbf{r}, -\hat{\boldsymbol{\Omega}}) + \rho_d \frac{q^{\text{inc}}(\mathbf{r})}{\pi} + \varepsilon I_{b,s}(\mathbf{r}) \right] - \right. \\ & \left. - \kappa \left[ \rho_s I(\mathbf{r}, -\hat{\boldsymbol{\Omega}}) + \rho_d \frac{q^{\text{inc}}(\mathbf{r})}{\pi} + \varepsilon I_{b,s}(\mathbf{r}) - I_b(\mathbf{r}) \right] + \right. \\ & \left. + \rho_s \left[ \boldsymbol{\Omega}_\tau \cdot \nabla_\tau I(\mathbf{r}, -\hat{\boldsymbol{\Omega}}) - \kappa \left( I(\mathbf{r}, -\hat{\boldsymbol{\Omega}}) - I_b(\mathbf{r}) \right) \right] \right\} I^* d\boldsymbol{\Omega} \mathbf{n} - \\ & - \rho_d \left[ \text{div}_\tau \boldsymbol{\alpha} + \kappa \left( \int_{\Omega_n > 0} I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} - 2\pi I_b \right) \right] \frac{q^{*,\text{inc}}}{\pi} \mathbf{n}, \quad \mathbf{r} \in S_o, \quad (17) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{u}_o^{(1)}(\mathbf{r}) = & -2 \left\{ \text{div}_\tau \left[ \rho_s \int_{\Omega_n > 0} \Omega_n \boldsymbol{\omega}(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega}) I^* d\boldsymbol{\Omega} \right] \mathbf{n} + \right. \\ & \left. + \rho_s \left[ \int_{\Omega_n > 0} \Omega_n [(\mathbf{J}_n)_\tau \boldsymbol{\omega}(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega})] I^* d\boldsymbol{\Omega} \right] \right\} + \\ & + \text{div}_\tau \left[ \rho_d \boldsymbol{\alpha} \frac{q^{*,\text{inc}}}{\pi} \right] \mathbf{n} + \rho_d [(\mathbf{J}_n)_\tau \boldsymbol{\alpha}] \frac{q^{*,\text{inc}}}{\pi}, \quad \mathbf{r} \in S_o, \quad (18) \end{aligned}$$

$$\mathbf{u}_o^{(2)}(\mathbf{r}) = \left[ \int_{\{\Omega_n=0, k(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega}) < 0\}} [I]_S(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega}) k(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega}) I^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} \right] \mathbf{n}, \quad \mathbf{r} \in S_o. \quad (19)$$

В результате градиент целевого функционала вычисляется по формуле

$$J'(S_o) = 2\mathbf{u}_o,$$

где векторное поле  $\mathbf{u}_o$  вычисляется по формулам (16)–(19),  $I^*$  — решение сопряженной задачи (14), (15), в которой  $\tilde{q}_d = A(S_o) - \bar{q}_d^{\text{inc}}$ .

Пусть оптимизируемая поверхность  $S_o$  задана конечным числом параметров в виде  $S_o(\mathbf{p})$ , где  $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_m)$  — параметры,  $m$  — число параметров. В этом случае целевой функционал является функцией  $m$  параметров:

$$\hat{J}(\mathbf{p}) \equiv J(S_o(\mathbf{p})) = \|A(S_o(\mathbf{p})) - \bar{q}_d^{\text{inc}}\|_{L_2(S_d)}^2,$$

и задача сводится к нахождению его градиента  $\nabla \hat{J}(\mathbf{p}) \equiv (\partial_{p_1} \hat{J}, \dots, \partial_{p_m} \hat{J})$ . Каждый из параметров  $p_i$  порождает однопараметрическое преобразование оптимизируемой поверхности  $S_o$ , которое обозначим символом  $\varphi_{p_i}^{(i)}$ . Пусть векторное поле  $\mathbf{v}_i$  задано формулой

$$\mathbf{v}_i(\mathbf{r}) = \frac{d\varphi_{p_i}^{(i)}(\mathbf{r})}{dp_i} \equiv \frac{d\varphi_{p_i+t}^{(i)}(\mathbf{r})}{dt} \Big|_{t=0+}, \quad \mathbf{r} \in S_o(\mathbf{p}).$$

Вывод дифференциала (13) целевого функционала остается справедливым и для такого векторного поля  $\mathbf{v}$ . Частная производная  $\partial \hat{J} / \partial p_i$  является дифференциалом целевого функционала  $J(S_o)$ , где  $S_o \equiv S_o(\mathbf{p})$ , относительно векторного поля  $\mathbf{v}_i$ , и, следовательно, задается формулой

$$\partial_{p_i} \hat{J} = (J'(S_o(\mathbf{p})), \mathbf{v}_i)_{L_2(S_o(\mathbf{p}))} \equiv 2(\mathbf{u}_o, \mathbf{v}_i)_{L_2(S_o(\mathbf{p}))}, \quad i = 1, \dots, m,$$

где  $J'(S_o)$  — градиент функционала  $J(S_o)$ , векторное поле  $\mathbf{u}_o$ , определенное формулами (16)–(19), вычисляется в результате решения сопряженной задачи (14), (15), в которой  $\tilde{q}_d = A(S_o(\mathbf{p})) - \tilde{q}_d^{\text{inc}}$ .

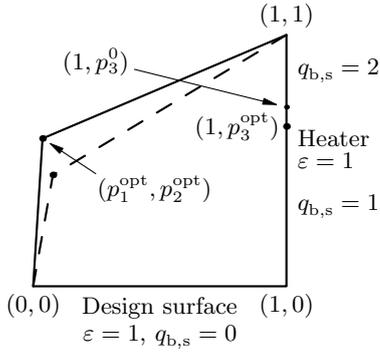
Целевой функционал может иметь не один локальный минимум, поэтому использовался следующий **алгоритм поиска глобального минимума**:

1. Простой случайный поиск (глобальный метод) используется для нахождения начального приближения для градиентного метода.
2. Градиентный метод (метод сопряженных градиентов) используется для нахождения минимума. Градиент целевого функционала вычисляется при помощи решения сопряженной задачи.

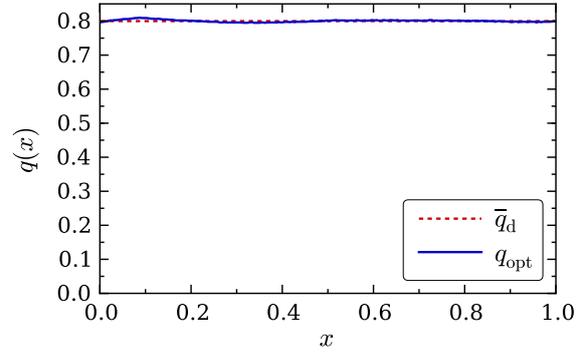
В тестовых задачах, имевших несколько локальных минимумов, при случайном поиске оказалось достаточно 100 вычислений целевого функционала (иногда было достаточно 50 вычислений). В результате приблизительно 150–200 вычислений целевого функционала было достаточно, чтобы найти глобальный минимум. Здесь подразумевается, что решение сопряженной задачи не сложнее решения исходной прямой задачи, то есть вычисление целевого функционала и его градиента не сложнее двух вычислений целевого функционала. Важно отметить, что глобальные методы минимизации требуют для нахождения глобального минимума многих тысяч вычислений минимизируемого функционала. То есть предложенный алгоритм требует в десятки раз меньше вычислений целевого функционала.

**Тестовая задача.** (Одна из нескольких тестовых задач.) Область показана на рис. 21. Граница области состоит из вертикальной поверхности нагревателя (коэффициент черноты  $\varepsilon = 1$ , поток черного тела на поверхности нижнего нагревателя  $q_{b,s} = 1$ , на поверхности верхнего —  $q_{b,s} = 2$ ), горизонтальной нагреваемой поверхности (коэффициент черноты  $\varepsilon = 1$ , поток черного тела  $q_{b,s} = 0$ ), и двух зеркально-диффузных поверхностей рефлекторов (коэффициент зеркального отражения  $\rho_s = 0.65$ , коэффициент диффузного отражения  $\rho_d = 0.25$ , коэффициент черноты  $\varepsilon = 0.1$ , поток черного тела  $q_{b,s} = 0$ ). Среда поглощающая с коэффициентом поглощения  $\kappa = 0.1$  и холодная, то есть  $I_b = 0$ . Форма области контролируется тремя параметрами:  $(p_1, p_2)$  — координаты ребра между рефлекторами, параметр  $p_3$  определяет точку  $(1, p_3)$  на поверхности нагревателя, разделяющую разные нагреватели. Цель оптимизации — найти координаты  $(p_1, p_2, p_3)$ , при которых тепловой поток на нагреваемой поверхности равен  $\tilde{q}_d^{\text{inc}} = 0.8$ .

Случайным поиском в качестве начального приближения для градиентного метода была найдена точка  $\mathbf{p}_0 = (0.078, 0.443, 0.713)$ , значение целевого функционала в ней



**Рис. 21.** Начальная и оптимальная формы области.



**Рис. 22.** Оптимальное распределение теплового потока.

равно  $\hat{J}(\mathbf{p}_0) = 8.4 \times 10^{-4}$ . Конечной точкой градиентной минимизации была  $\mathbf{p}_{\text{opt}} = (0.037, 0.588, 0.636)$ , значение целевого функционала в ней равно  $\hat{J}(\mathbf{p}_{\text{opt}}) = 1.0 \times 10^{-5}$ .

### Глава 5. Обобщенное линейное уравнение Больцмана, описывающее неклассический перенос, и асимптотическое приближение к нему [16].

В разделе 5.1 описывается модель переноса, в которой распределение длины свободного пробега частиц произвольно. Эта модель обобщает классическую модель переноса частиц (излучения), в которой коэффициенты ослабления и рассеяния (или полное сечение и сечение рассеяния) не зависят от длины свободного пробега частиц. В обобщенной модели эти коэффициенты зависят от длины свободного пробега. В этом случае фазовая плотность частиц принимает вид  $\xi(\mathbf{r}, t, \mathbf{v}, l)$ , где  $\mathbf{r}$  — координата,  $t$  — время,  $\mathbf{v}$  — вектор скорости,  $l$  — длина свободного пробега частиц. Рассматривается перенос в  $d$ -мерном пространстве:  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^d$ ,  $\mathbf{v} \in \mathbb{V} \subset \mathbb{R}^d$ ,  $\mathbb{V}$  — «пространство» скоростей. Фазовая плотность удовлетворяет уравнению [W. Alt, 1980]

$$\partial_t \xi + v \partial_l \xi + \mathbf{v} \cdot \nabla \xi + v \sigma \xi = 0, \quad (20)$$

где  $\nabla$  — градиент по пространственной переменной  $\mathbf{r}$ ,  $\sigma \equiv \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v}, l)$  — коэффициент ослабления,  $v = |\mathbf{v}|$ . Это уравнение описывает плотность невзаимодействующих частиц, движущихся в точке  $\mathbf{r}$  со скоростью  $\mathbf{v}$  так, что они прекращают свободное движение (рассеиваются или поглощаются) с вероятностью в единицу времени  $v\sigma$ .

Уравнение (20) дополняется условием, которое описывает плотность частиц, начинающих свободное движение,

$$\xi|_{l=0} \equiv \eta(\mathbf{r}, t, \mathbf{v}) = \mathcal{S} \left[ \int_0^\infty \sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}, l') \xi(\mathbf{r}, t, \mathbf{v}, l') dl' \right] + \frac{1}{v} F(\mathbf{r}, t, \mathbf{v})$$

(модифицировано из [W. Alt, 1980]), где

$$\mathcal{S}f(\mathbf{r}, t, \mathbf{v}) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{\mathbb{V}} K(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{v}') f(\mathbf{r}, t, \mathbf{v}') d\mathbf{v}'$$

— оператор рассеяния,  $K(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{v}') \equiv K(\mathbf{r}, \mathbf{v}' \rightarrow \mathbf{v})$  — ядро рассеяния ( $K \geq 0$  и  $\int_{\mathbb{V}} K(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{v}') d\mathbf{v} = 1$ ),  $\sigma_s \equiv \sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}, l)$  — коэффициент рассеяния,  $\sigma_s \leq \sigma$ ,  $F$  — плотность источников частиц.

В начальный момент времени  $t = 0$  все частицы начинают свободное движение. В этом случае начальное условие принимает вид

$$\xi|_{t=0} = \chi(\mathbf{r}, \mathbf{v}) \delta(l),$$

где  $\delta(\cdot)$  дельта-функция Дирака.

**В разделе 5.2** выводится обобщенное линейное уравнение Больцмана, которое описывает поведение плотности

$$\psi(\mathbf{r}, t, \mathbf{v}) = \int_0^\infty \xi(\mathbf{r}, t, \mathbf{v}, l) dl.$$

Эта плотность удовлетворяет обобщенному линейному уравнению Больцмана

$$\begin{aligned} \partial_t \psi + \mathbf{v} \cdot \nabla \psi = & \int_{\mathbb{V}} K(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{v}') \left[ (v')^2 \int_0^t \phi_s(\mathbf{r}, \mathbf{v}', v' \tau) \psi(\mathbf{r} - \mathbf{v}' \tau, t - \tau, \mathbf{v}') d\tau \right] d\mathbf{v}' \\ & - v^2 \int_0^t \phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, v \tau) \psi(\mathbf{r} - \mathbf{v} \tau, t - \tau, \mathbf{v}) d\tau + F(\mathbf{r}, t, \mathbf{v}), \end{aligned} \quad (21)$$

где

$$\mathcal{L}\phi(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \lambda) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{L}p(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \lambda) / \mathcal{L}S(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \lambda) \quad (22)$$

— ядро памяти (memory kernel),  $\mathcal{L}f(\lambda) = \int_0^\infty e^{-\lambda l} f(l) dl$  — преобразование Лапласа,

$$S(\mathbf{r}, \mathbf{v}, l) = \exp \left\{ - \int_0^l \sigma(\mathbf{r} - \boldsymbol{\Omega}(l - l'), \mathbf{v}, l') dl' \right\}$$

— вероятность дожития (survival probability),

$$p(\mathbf{r}, \mathbf{v}, l) = \sigma(\mathbf{r}, \mathbf{v}, l) S(\mathbf{r}, \mathbf{v}, l).$$

Ядро  $\phi$  определяется аналогично с заменой  $\sigma$  на  $\sigma_s$ .

Начальное условие:

$$\psi|_{t=0} = \chi(\mathbf{r}, \mathbf{v}).$$

Если коэффициенты ослабления и рассеяния не зависят от длины свободного пробега, то уравнение (21) превращается в обычное линейное уравнение Больцмана.

**В разделе 5.3** выводится интегральное уравнение для плотности  $\psi$ .

Уже решение линейного уравнения Больцмана представляет значительные сложности. Это тем более справедливо для обобщенного уравнения Больцмана. В некоторых случаях диффузионное приближение к линейному уравнению Больцмана оказывается адекватным. Представляет интерес вывод аналогичного приближения для обобщенного уравнения Больцмана. **В разделе 5.4** в предположении, что первый и второй моменты распределения длины свободного пробега частиц конечны, выводится асимптотическое решение задачи Коши для обобщенного уравнения Больцмана при малой средней длине свободного пробега частиц. Для простоты рассматривается перенос в трехмерном пространстве  $\mathbb{R}^3$ . Обобщение на  $d$ -мерное пространство не представляет сложностей.

Предполагается, что среда изотропна, то есть ядро рассеяния имеет вид  $K(\mathbf{r}, \mathbf{v}, \mathbf{v}') \equiv K(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\Omega}', v, v')$ , где  $\boldsymbol{\Omega} = \mathbf{v}/v$ ,  $v = |\mathbf{v}|$ , и аналогично для  $\boldsymbol{\Omega}'$ . Кроме того, предполагается, что ядро ограничено снизу и сверху:  $0 < K_{\min} \leq K \leq K_{\max} < \infty$ , то есть  $\int_{\mathbb{V}} \int_{\mathbb{V}} |K(\cdot, \mathbf{v}, \mathbf{v}')|^2 d\mathbf{v}' d\mathbf{v} < \infty$ . Предполагается также, что «пространство» скоростей  $\mathbb{V} \subset \mathbb{R}^3$  ограничено и инвариантно относительно вращений, и что все частицы имеют ненулевые скорости. Множество абсолютных величин скоростей обозначается через  $V$ .

Предполагается, что коэффициенты ослабления и рассеяния не зависят от  $\mathbf{r}$ , и коэффициент рассеяния равен  $\sigma_s(v, l) = \omega \sigma(v, l)$ , где  $\omega$  — альbedo рассеяния (оба коэффициента зависят от абсолютной скорости  $v$ , а не вектора скорости  $\mathbf{v}$ , поскольку среда изотропна).

Если средняя длина свободного пробега мала и имеет порядок  $\varepsilon$ , где  $\varepsilon$  — малый параметр, то коэффициент ослабления представляется в виде  $\sigma(v, l) = \varepsilon^{-1} \bar{\sigma}(v, \varepsilon^{-1}l)$ , где коэффициент ослабления  $\bar{\sigma}$  не зависит от  $\varepsilon$ . В этом случае ядро  $\phi$  (22) имеет вид  $\phi(v, l) = \varepsilon^{-2} \bar{\phi}(v, \varepsilon^{-1}l)$ , где ядро  $\bar{\phi}$  не зависит от  $\varepsilon$ . Предполагается, что альbedo рассеяния имеет вид  $\omega = 1 - \varepsilon^2 \alpha$ . Это означает, что рассеяние в среде доминирует, а поглощение мало и имеет порядок  $\varepsilon^2$ . Предполагается, что плотность источников мала, имеет порядок  $\varepsilon$ , и представляется в виде  $F = \varepsilon \bar{F}$ .

Для нахождения асимптотического решения плотность представляется в виде

$$\psi(\mathbf{r}, t, \mathbf{v}) = \psi^o(\mathbf{r}, t^o, \mathbf{v}) + \psi^i(\mathbf{r}, t^i, \mathbf{v}),$$

где  $t^o = \varepsilon t$ ,  $t^i = t/\varepsilon$ ,  $\psi^o$  и  $\psi^i$  — внешнее и внутреннее решения, соответственно. Внешнее решение аппроксимирует плотность вне начального пограничного слоя, а внутреннее решение — внутри пограничного слоя.

Внешнее решение  $\psi^o$  представляется в виде асимптотического ряда

$$\psi^o \sim \psi_0^o + \psi_1^o \varepsilon + \psi_2^o \varepsilon^2 + \dots \quad \text{при } \varepsilon \rightarrow 0.$$

Нулевой член асимптотического ряда имеет вид

$$\psi_0^o(\mathbf{r}, t^o, v) = \Upsilon(\mathbf{r}, v) \rho(\mathbf{r}, t^o),$$

где

$$\Upsilon(\mathbf{r}, v) = [C(\mathbf{r})]^{-1} \Psi(\mathbf{r}, v) / (\bar{\phi}_0 v),$$

$\Psi$  — положительное решение интегрального уравнения 2-го рода  $(\mathcal{I} - \mathcal{S}) \Psi = 0$ ,

$$C(\mathbf{r}) = \int_{\mathbb{V}} \Psi / (\bar{\phi}_0 v) d\mathbf{v} \equiv 4\pi \int_V \Psi v / \bar{\phi}_0 dv$$

— нормирующий коэффициент. Выполняется соотношение

$$\rho(\mathbf{r}, t^o) = \int_{\mathbb{V}} \psi_0^o(\mathbf{r}, t^o, v) d\mathbf{v} \equiv 4\pi \int_V \psi_0^o(\mathbf{r}, t^o, v) v^2 dv,$$

то есть  $\rho$  это суммарная плотность частиц в точке  $\mathbf{r}$ .

Плотность  $\rho$  удовлетворяет уравнению диффузии со сносом, поглощением и источниками

$$\partial_{t^o} \rho - \operatorname{div}(\bar{D} \nabla \rho) + \operatorname{div}(\bar{\mathbf{a}} \rho) + \bar{\gamma} \rho = \bar{f},$$

где коэффициент диффузии, вектор сноса, коэффициент поглощения и плотность источников имеют вид, соответственно,

$$\begin{aligned} \bar{D}(\mathbf{r}) &= \frac{4\pi}{3} \int_V \frac{1}{\bar{\phi}_0} \mathcal{O}(v \Upsilon) v^2 dv, & \bar{\mathbf{a}}(\mathbf{r}) &= -\frac{4\pi}{3} \int_V \frac{1}{\bar{\phi}_0} \mathcal{O}(v \nabla \Upsilon) v^2 dv, \\ \bar{\gamma}(\mathbf{r}) &= 4\pi \alpha \int_V \bar{\phi}_0 \Upsilon v^3 dv, & \bar{f}(\mathbf{r}, t^o) &= \int_{\mathbb{V}} \bar{F} d\mathbf{v}, \end{aligned}$$

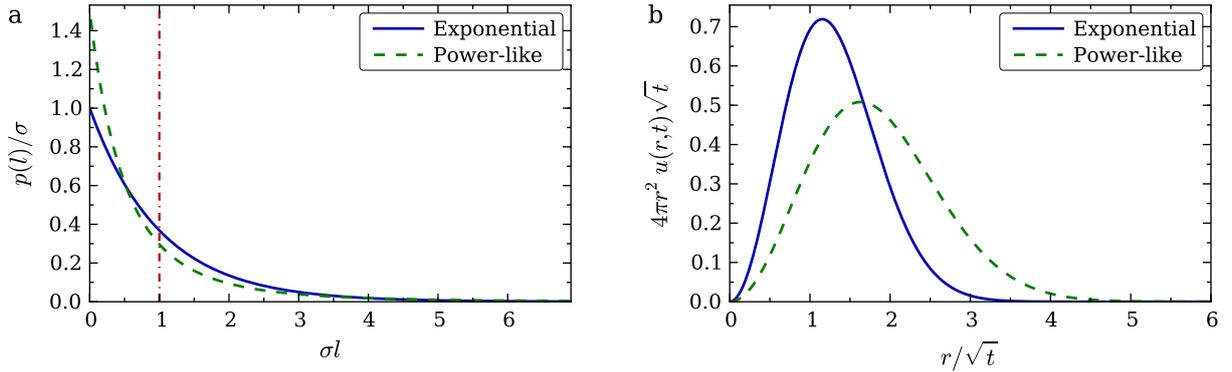
$\mathcal{O} = (\mathcal{I} - \mathcal{S}_1)^{-1} + \bar{\phi}_1 \mathcal{I}$ . Начальное условие имеет вид

$$\rho|_{t=0} = \langle \bar{\phi}_0 v \chi, \Psi \rangle_{L_2(\mathbb{V})} / \langle \bar{\phi}_0 v \Upsilon, \Psi \rangle_{L_2(\mathbb{V})}.$$

Выведены также уравнение и начальное условие для нулевого члена  $\psi_0^i$  асимптотического ряда для внутреннего решения  $\psi^i$ .

**В разделе 5.5** рассматривается частный случай: диффузионное приближение к односкоростному обобщенному уравнению Больцмана.

**Пример.** Поправка к коэффициенту диффузии из-за неэкспоненциального распределения длины свободного пробега может быть весьма значительной. Это иллюстрируется на рис. 23. Рис. 23а показывает различные плотности: плотность экспоненциального распределения  $p(l) = \sigma e^{-\sigma l}$  и плотность степенного распределения  $p(l) = \sigma \nu / (\nu - 1) [1 + \sigma l / (\nu - 1)]^{-(\nu+1)}$ . Оба распределения имеют одинаковые средние, равные  $1/\sigma$ . Рис. 23b показывает решения задачи Коши для уравнения диффузии в трехмерном пространстве  $\partial_t u - D \Delta u = 0$  с начальным условием  $u|_{t=0} = \delta(\mathbf{r})$  (рассеяние изотропно). Коэффициент диффузии, соответствующий степенному распределению при  $\nu = 3$ , оказывается в этом случае в два раза больше коэффициента диффузии, соответствующего экспоненциальному распределению. При  $\nu = 2.5$  отношение коэффициентов диффузии равно трем, а при  $\nu = 2.1$  — одиннадцати.



**Рис. 23.** (а) Экспоненциальное и степенное ( $\nu = 3$ ) распределения с одинаковыми средними. (б) Соответствующие решения задачи Коши для уравнения диффузии в трехмерном пространстве.

**В Заключение** перечислены основные результаты работы и сформулированы выводы.

## Выводы

- Решенные задачи демонстрируют, что  $D_1$  приближение к линейному уравнению Больцмана оказывается, вообще говоря, лучше диффузионного, которое можно считать  $D_0$  приближением. При этом, как показано в других работах,  $D_N$  приближения при  $N \geq 2$  демонстрируют очевидное нефизичное поведение. Тем не менее требуется более глубокое исследование  $D_1$  приближения в более широком круге задач.

- Несмотря на большое число методов решения задач переноса излучения, задачи с зеркальными границами и прозрачными зеркальными границами раздела сред с отличающимися показателями преломления тем не менее представляют проблему.

Построенные квадратурные схемы на единичной сфере используют кусочно-квазилинейную интерполяцию и предназначены в первую очередь для решения задач переноса излучения с зеркальными границами. Они несколько уступают по точности обычным квадратурным схемам на единичной сфере, однако использование тех в задачах с зеркальными границами весьма проблематично.

Разработанные численные схемы решения прямых задач переноса излучения в осесимметричных областях в областях сложной формы, также направлены в первую очередь на задачи, в которых имеются зеркальные границы и прозрачные зеркальные границы раздела сред с отличающимися показателями преломления. На основе этих

численных схем был разработан комплекс программ, который был использован при численном моделировании роста полупрозрачных кристаллов из расплава.

- Задачи оптимизации граничных значений или формы области в задачах переноса излучения представляют большой практический интерес. В то же время такие задачи сложны и до сих пор часто решаются методом проб и ошибок. Единого подхода к решению таких задач до сих пор не существовало. Отдельные задачи решались методами и приемами, применимость которых была ограничена решаемыми задачами, или которые могли быть распространены на довольно узкий класс задач. Предложенный единый подход к решению задач оптимизации комбинирует глобальный и градиентный (локальный) методы минимизации. Сам по себе этот подход не нов, но в задачах переноса излучения он до сих пор не применялся из-за их сложности.

Известно, что использование градиентных методов для нахождения глобального минимума проблематично, а глобальные методы требуют очень много вычислений минимизируемой функции. В используемом подходе глобальный метод используется для нахождения окрестности глобального минимума, а градиентный метод используется для более эффективного поиска самого минимума. Для нахождения градиента целевого функционала используется метод сопряженной задачи, позволяющий вычислить градиент при помощи решения сначала исходной (прямой), а затем сопряженной задачи, причем этот метод используется как в «краевых» (нахождение оптимальных граничных значений), так и в «геометрических» (нахождение оптимальной формы области) задачах. Отметим, что как определение, так и вычисление «градиента» функционала, зависящего от формы области, представляет из себя нетривиальную задачу.

Важно подчеркнуть, что решение сопряженной задачи не сложнее решения исходной, поскольку сопряженная всегда линейна, даже если исходная нелинейна. Кроме того, значение целевого функционала в точке, в которой ищется градиент, все равно вычисляется, то есть решается исходная задача. Поэтому «цена» вычисления градиента в этой точке фактически оказывается не больше «цены» вычисления целевого функционала в ней.

Принципиальное достоинство предложенного подхода заключается в том, что он может быть непосредственно распространен на еще более сложные задачи оптимизации систем сложного тепло- и массопереноса (когда присутствуют несколько разных видов тепло- и массопереноса).

- Линейное уравнение Больцмана это мезоскопическая модель переноса частиц, основанная на предположении, что распределение длины свободного пробега частиц подчиняется экспоненциальному закону. Если такое распределение действительно экспоненциально, то достаточно оценить среднюю длину свободного пробега, все остальные моменты экспоненциального распределения выражаются через его среднее. Однако распределение длины свободного пробега экспоненциально далеко не всегда. Ошибка, вызванная неверным представлением об этом распределении, может быть значительной. Выведенное обобщенное линейное уравнение Больцмана является моделью переноса частиц, в которой распределение длины свободного пробега частиц произвольно.

Уже решение линейного уравнения Больцмана представляет значительные сложности. Это тем более справедливо для обобщенного уравнения Больцмана. В предположении, что первый и второй моменты распределения длины свободного пробега частиц конечны, выведено асимптотическое решение задачи Коши для обобщенного уравнения Больцмана при малой средней длине свободного пробега частиц. При

этом внешнее асимптотическое решение, приближающее решение вне начального пограничного слоя, описывается уравнением диффузии со сносом, поглощением и источниками.

## Основные публикации по теме диссертации

1. S. A. Rukolaine, V. S. Yuferev. Discrete ordinates quadrature schemes based on the angular interpolation of radiation intensity. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 69:257–275, 2001.
2. S. A. Rukolaine, M. G. Vasilyev, V. S. Yuferev, A. O. Galyukov. Numerical solution of axisymmetric radiative transfer problems in arbitrary domains using the characteristic method. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 73:205–217, 2002.
3. С. А. Руколайне, М. Шлегель, М. Г. Васильев, Я. В. Васильев, В. С. Юферев, Э. Н. Колесникова. Численное исследование радиационно-кондуктивного теплообмена при выращивании кристаллов германата висмута низкоградиентным методом Чохральского. *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, 2002(6):63–68, 2002.
4. I. Yu. Evstratov, S. A. Rukolaine, V. S. Yuferev, M. G. Vasiliev, A. B. Fogelson, V. M. Mamedov, V. N. Shlegel, Ya. V. Vasiliev, Yu. N. Makarov. Global analysis of heat transfer in growing BGO crystals ( $\text{Bi}_4\text{Ge}_3\text{O}_{12}$ ) by low-gradient Czochralski method. *J. Crystal Growth*, 235:371–376, 2002.
5. V. S. Yuferev, O. N. Budenkova, M. G. Vasilyev, S. A. Rukolaine, V. N. Shlegel, Ya. V. Vasiliev, A. I. Zhmakin. Variations of solid-liquid interface in the BGO low thermal gradient Cz growth for diffuse and specular crystal side surface. *J. Crystal Growth*, 253:383–397, 2003.
6. S. A. Rukolaine, M. G. Vasilyev, V. S. Yuferev, V. M. Mamedov. A numerical scheme for the solution of axisymmetric radiative transfer problems in irregular domains filled by media with opaque and transparent diffuse and specular boundaries. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 84:371–382, 2004.
7. O. N. Budenkova, M. G. Vasilyev, S. A. Rukolaine, V. S. Yuferev. Radiative heat transfer in axisymmetric domains of complex shape with Fresnel boundaries. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 84:451–463, 2004.
8. В. М. Мамедов, С. А. Руколайне. Численное решение задач радиационного теплопереноса в областях нерегулярной формы с зеркальными (френелевскими) границами. Осесимметричный случай. *Математическое моделирование*, 16(10):15–28, 2004.
9. S. A. Rukolaine. Regularization of inverse boundary design radiative heat transfer problems. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 104:171–195, 2007.
10. С. А. Руколайне. Регулярное решение обратных задач оптимального проектирования осесимметричных систем радиационного теплопереноса. *Теплофизика высоких температур*, 46(1):126–134, 2008.
11. М. Г. Васильев, В. М. Мамедов, С. А. Руколайне, В. С. Юферев. Оптимизация тепловыделения в многосекционном нагревателе при выращивании кристаллов германата висмута низкоградиентным методом Чохральского. *Изв. РАН. Сер. физ.*, 73(10):1491–1495, 2009.
12. S. A. Rukolaine. The shape gradient of the least-squares objective functional in optimal shape design problems of radiative heat transfer. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 111:2390–2404, 2010.

13. S. A. Rukolaine, A. M. Samsonov. Local immobilization of particles in mass transfer described by a Jeffreys-type equation. *Phys. Rev. E*, 88:062116 [15 pp.], 2013.
14. S. A. Rukolaine. Shape optimization of radiant enclosures with specular-diffuse surfaces by means of a random search and gradient minimization. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 151:174–191, 2015.
15. S. A. Rukolaine, O. I. Chistiakova. Probing the  $D_1$  approximation to the linear Boltzmann equation in 3D. *Int. J. Heat Mass Transfer*, 95:7–14, 2016.
16. S. A. Rukolaine. Generalized linear Boltzmann equation, describing non-classical particle transport, and related asymptotic solutions for small mean free paths. *Physica A*, 450:205–216, 2016.