

УДК 669.018.548

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ДИНАМИКИ РОСТА ЧАСТИЦЫ В ДВУХКОМПОНЕНТНОМ СПЛАВЕ*

*Япарова Н.М., к.ф.-м.н., доцент, заведующий кафедрой «Вычислительная математика
и высокопроизводительные вычисления» (iaparovanm@susu.ru)*

Южно-Уральский государственный университет (НИУ)
(454080, Россия, Челябинск, пр. Ленина, 76)

Аннотация. Рассмотрена проблема изменения размеров частицы новой фазы в процессе ее роста в двухкомпонентном сплаве. Частица формируется из продуктов химических реакций, проходящих на границе раздела фаз. Обобщенная математическая модель роста частицы включает уравнения диффузии для каждого из компонентов фазы и массопереноса в граничном слое, а также уравнение, характеризующее изменение размеров растущей частицы. Предложен подход, позволяющий осуществить редукцию обобщенной модели к системе дифференциальных уравнений, описывающих состояние растущей частицы. Полученная система уравнений послужила основой для разработки численного метода определения изменения радиуса сферической частицы в зависимости от времени. Вычислительная схема метода включает конечно-разностные аналоги уравнений с дополнительно введенными регуляризирующими функционалами. Привлечение регуляризирующего подхода обеспечивает устойчивость вычислительной схемы метода относительно накапливаемых вычислительных погрешностей. Такой подход к разработке метода определения изменений радиуса частицы впервые позволил преодолеть ограничения по продолжительности наблюдения за изменением радиуса частицы. С целью проверки надежности, эффективности предложенного метода определения изменений радиуса частицы и получения экспериментальных оценок отклонений найденных радиусов от действительных значений проведены вычислительные эксперименты. В ходе экспериментов определены изменения радиуса частицы в различные моменты времени с помощью предложенного численного метода. Проведен сравнительный анализ найденных радиусов с тестовыми значениями и получены экспериментальные оценки отклонений вычисленных радиусов от тестовых функций. Результаты экспериментов и сравнительного анализа подтверждают надежность и достаточный уровень точности разработанного численного метода.

Ключевые слова: многокомпонентный сплав, рост частицы, формирование новой фазы, уравнение диффузии, массоперенос, численный метод, регуляризация, оценка погрешности.

DOI: 10.17073/0368-0797-2020-2-135-139

ВВЕДЕНИЕ

Изучение процесса роста кристаллов в многокомпонентном расплаве является важной практической и теоретической проблемой. Фундаментальные теоретические исследования принадлежат А.Н. Колмогорову [1], М. Авраму [2], М. Фольмеру [3]. Различным методам математического моделирования роста частиц в многокомпонентных расплавах и исследования структур частицы посвящены работы [4 – 9].

Важной проблемой, возникающей при использовании вычислительных алгоритмов, разработанных на основе существующих подходов, является быстрое накопление вычислительных ошибок и, как следствие, потеря точности. В результате расчеты проводятся только на начальной фазе роста частицы. Для дальнейшего вычисления требуется разработка новых численных методов определения радиуса.

* Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках базовой части государственного задания «Разработка, исследование и реализация алгоритмов обработки данных динамических измерений пространственно-распределенных объектов», ТЗ 8.9692.2017/8.9 от 17.02.2017 г.

В последние годы результаты математических исследований широко используются в прикладных исследованиях. Использование математического аппарата позволяет решать прикладные задачи на качественно более высоком уровне [10 – 14], а разработка методов решения задач тепло- и массопереноса, устойчивых относительно возникающих погрешностей, является актуальной научно-технической задачей [15 – 19].

В настоящей работе рассматривается математическая модель задачи измерения, связанной с ростом частицы в процессе производства стали. Предложен численный метод расчета радиуса растущей частицы. Расчетная схема основана на использовании конечно-разностных уравнений и методе регуляризации. Применение регуляризирующего подхода обеспечивает устойчивость вычислительной процедуры. Эффективность предложенного метода была проверена с помощью экспериментов, результаты которых подтверждают устойчивость и точность вычислительной процедуры.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА

Расплав содержит m химических реагентов Q_1, Q_2, \dots, Q_m , которые взаимодействуют друг с другом

в химических реакциях, протекающих на поверхности частицы:

$$\begin{cases} n_{11}Q_1 + n_{12}Q_2 + \dots + n_{1m}Q_m = P_1; \\ \dots \\ n_{k1}Q_1 + n_{k2}Q_2 + \dots + n_{km}Q_m = P_k, \end{cases}$$

где n_{ij} – стехиометрические коэффициенты реакций; P_k – продукт реакции.

Образование продуктов реакций P_1, P_2, \dots, P_k вызывает рост включения. Рост частицы осуществляется одинаково во всех направлениях. Включения имеют сферическую форму.

Предполагая, что начальное распределение параметров (концентрации компонентов, скорости, температуры) состояния системы имеет сферическую симметрию, то и распределение всех характеристических параметров имеет сферическую симметрию в любое время.

Введем сферическую систему координат с центром в центре растущей частицы, используя следующие обозначения: r – расстояние от центра частицы до текущей точки расплава; t – время; Φ – фаза растущей частицы; Ψ – фаза раствора, окружающая частицу; $R(t)$ – радиус частицы; M_{P_i} – молярная масса продукта P_i ; M_{Q_j} – молярная масса реагента Q_j ; ρ^Φ и ρ^Ψ – плотность фаз Φ и Ψ .

Функция $u_i^\Phi(r, t)$ характеризует массовую концентрацию компонентов P_i , а функция $u_j^\Psi(r, t)$ соответствует массовой концентрации реагента Q_j . Исходя из предположений математической модели, закона Фика, и следуя подходу, предложенному в работе [6], получаем, что после замены переменных $x = r/R$ рассматриваемая математическая модель роста частицы включает следующие уравнения:

– уравнение диффузии для фазы Φ :

$$\frac{\partial u_i^\Phi}{\partial t} = \frac{D_i^\Phi}{R^2 x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 \frac{\partial u_i^\Phi}{\partial x} \right) + x \frac{R'}{R} \frac{\partial u_i^\Phi}{\partial x}, \quad 0 < x < 1, \quad i = \overline{1, k-1}; \quad (1)$$

– уравнение диффузии для фазы Ψ :

$$\frac{\partial u_j^\Psi}{\partial t} = \frac{D_j^\Psi}{R^2 x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 \frac{\partial u_j^\Psi}{\partial x} \right) + \left(x^3 + \frac{\rho^\Phi}{\rho^\Psi - 1} \right) \frac{1}{x^2} \frac{R'}{R} \frac{\partial u_j^\Psi}{\partial x}, \quad x > 1, \quad j = \overline{1, m-1}; \quad (2)$$

– уравнения массопереноса на границе раздела фаз:

$$\rho^\Phi D_i^\Phi \frac{\partial}{\partial x} u_i^\Phi(1-0, t) + u_i^\Phi(1, t) \sum_{s=1}^k v_s I_s - v_i I_i = 0, \quad i = \overline{1, k-1}; \quad (3)$$

$$\rho^\Psi D_i^\Psi \frac{\partial}{\partial x} u_j^\Psi(1+0, t) + \sum_{i=1}^k [v_{ij} + u_j^\Psi(1, t)v_i] I_i = 0, \quad j = \overline{1, m-1}; \quad (4)$$

– уравнение роста частицы:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{1}{\rho^\Phi} \sum_{i=1}^k v_i I_i, \quad (5)$$

где R – радиус растущей частицы; R' – скорость изменения радиуса растущей частицы; D_i^Φ и D_j^Ψ – коэффициенты диффузии величин P_i и Q_j ; I_i – мольная скорость роста P_i , $v_i = M_{P_i}$; $v_{ij} = -M_{Q_j} n_{ij}$; $i = \overline{1, k}$, $j = \overline{1, m}$; I_s – мольная скорость роста P_s ; v_s – молярная масса P_s .

В этой модели граничные условия имеют следующий вид:

$$u_i^\Phi(0, t) = u_i^{0\Phi}; \quad \frac{\partial u_i^\Phi(0, t)}{\partial x} = 0; \quad i = \overline{1, k-1}; \quad (6)$$

$$u_j^\Psi(F^E, t) = u_j^{F\Psi}; \quad \frac{\partial u_j^\Psi(F^E, t)}{\partial x} = 0, \quad (7)$$

где $u_i^{0\Phi}$ – функция, постоянная во времени; F^E – внешняя поверхность расплава.

Кроме того, в начальный момент времени известно, что величина $R(0) = R_0$. В рассматриваемой задаче требуется найти функцию $R(t)$, характеризующую радиус растущей частицы.

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ РАДИУСА ЧАСТИЦЫ

Для двухкомпонентного расплава математическая модель задачи (1) – (7) составляется для двух реагентов Q_1, Q_2 и двух компонентов P_1, P_2 . Для расчета радиуса частицы достаточно рассмотреть соотношения для фазы Φ .

Построение методом определения радиуса растущей частицы в двухкомпонентном растворе предлагается провести следующим образом. Сначала уравнение (4) массопереноса подставим в выражение (5) роста частицы. Тогда формула (5) примет следующий вид:

$$\frac{dR}{dt} = \frac{1}{\rho^\Phi} \sum_{i=1}^2 D_i^\Phi \left(\frac{\partial u_i^\Phi(1-0, t)}{\partial x} \right).$$

Таким образом, определение радиуса частицы проводится на основе следующих соотношений:

$$\frac{\partial u_i^\Phi}{\partial t} = \frac{D_i^\Phi}{R^2 x^2} \frac{\partial}{\partial x} \left(x^2 \frac{\partial u_i^\Phi}{\partial x} \right) + x \frac{R'}{R} \frac{\partial u_i^\Phi}{\partial x}, \quad 0 < x < 1, \quad t \geq 0, \quad i = 1, 2; \quad (8)$$

$$\frac{dR}{dt} = \frac{1}{\rho^\Phi} \sum_{i=1}^2 D_i^\Phi \left(\frac{\partial u_i^\Phi(1-0, t)}{\partial x} \right); \quad (9)$$

$$u_i^\Phi(0, t) = u_i^{0\Phi}, \quad \frac{\partial u_i^\Phi(0, t)}{\partial x} = 0, \quad i = 1, 2; \quad (10)$$

$$R(0) = R_0, u_i^\Phi(x, 0) = \beta_i(x, R_0), i = 1, 2. \quad (11)$$

Далее перейдем к уравнениям конечно-разностного аналога задачи (8) – (11). Введем следующие обозначения: u^* и u^\wedge – функции u_1^Φ и u_2^Φ ; D^* и D^\wedge – функции D_1^Φ и D_2^Φ . В области $[0, 1] \times [0, T]$ введем конечно-разностную сетку G :

$$G = \left\{ \begin{array}{l} (x_n, t_s) : x_n = (n-1)h, t_s = (s-1)\tau, \\ h = \frac{1}{N}; \tau = \frac{T}{M}; n = \overline{1, N+1}; s = \overline{1, M+1}. \end{array} \right.$$

Используя конечно-разностные аналоги частных производных [20], получаем, что соотношение (8), включающее два уравнения диффузии, и уравнение (9) примут вид:

$$\frac{u_{n,s+1}^* - u_{n,s}^*}{\tau} = \left[\frac{2D^*}{(n-1)hR_s^2} - \frac{(n-1)h(R_{s+1} - R_s)}{R_s\tau} \right] \times \frac{u_{n+1,s}^* - u_{n,s}^*}{h} + \frac{2D^*}{R_s^2} + \frac{u_{n+1,s}^* - 2u_{n,s}^* + u_{n-1,s}^*}{h^2}; \quad (12)$$

$$\frac{u_{n,s+1}^\wedge - u_{n,s}^\wedge}{\tau} = \left[\frac{2D^\wedge}{(n-1)hR_s^2} - \frac{(n-1)h(R_{s+1} - R_s)}{R_s\tau} \right] \times \frac{u_{n+1,s}^\wedge - u_{n,s}^\wedge}{h} + \frac{2D^\wedge}{R_s^2} + \frac{u_{n+1,s}^\wedge - 2u_{n,s}^\wedge + u_{n-1,s}^\wedge}{h^2}; \quad (13)$$

$$\frac{R_{s+1} - R_s}{\tau} = \frac{1}{\rho^\Phi} \left(\frac{u_{N,s}^* - u_{N-1,s}^*}{h} + \frac{u_{N,s}^\wedge - u_{N-1,s}^\wedge}{h} \right), \quad (14)$$

где $u_{n,s}^*$ – концентрация первого компонента; $u_{n,s}^\wedge$ – концентрация второго компонента в точке x_n в момент времени t_s ; R_s – радиус частицы в момент времени t_s ; ρ^Φ – плотность фазы Φ .

Для достижения устойчивости вычислительной схемы в уравнения (13) и (14) вводят дополнительный стабилизирующий функционал, а шаги дискретизации h и τ выбираются в соответствии со специальными условиями. Построенная вычислительная схема предполагает решение полученных уравнений относительно переменной, характеризующей время. Предложенный подход послужил основой для разработки численного метода определения изменений радиуса частицы. С целью проверки надежности, эффективности и устойчивости предложенного метода определения изменений радиуса частицы, а также для получения экспериментальных оценок отклонений результатов расчета радиусов R_δ от действительных значений проведены вычислительные эксперименты.

РЕЗУЛЬТАТЫ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

В экспериментах надежность и точность вычислительной схемы были проверены путем сравнения чис-

ленных результатов расчета радиуса R_δ роста частиц с тестовыми значениями $R(t)$.

Первый этап экспериментов включал моделирование тестовых функций u^* и u^\wedge , характеризующих массовую концентрацию компонентов. При построении функций u^* и u^\wedge предполагали, что диффузионные процессы были завершены в фазе Ψ , функции u^* и u^\wedge массовой концентрации на поверхности фазы Φ приняли значения 0,020 и 0,002. Затем, используя уравнения (12) и (13), тестовые значения $R(t)$ и условия (10) и (11), выполнили численное моделирование функций u^* и u^\wedge .

Далее проведено численное решение задачи определения радиуса растущей частицы (8 – 11). Решение R_δ задачи (8 – 11) находили с помощью предложенного метода. В завершение проведен сравнительный анализ полученных результатов R_δ с тестовыми значениями $R(t)$.

Для сравнения численного решения R_δ с тестовыми функциями $R(t)$, для получения экспериментальных оценок погрешности метода была использована функция Δ_R , определяемая по следующей формуле:

$$\Delta_R = |R_\delta - R(t)|.$$

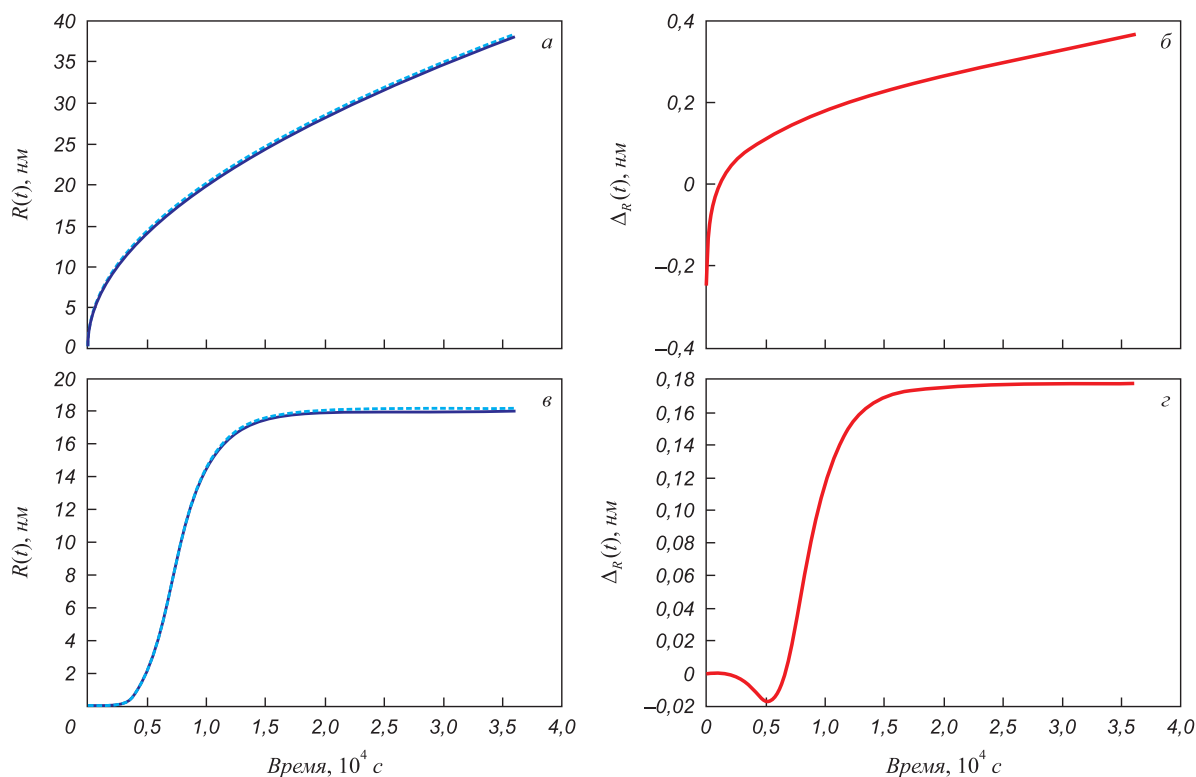
На рисунке приведены результаты экспериментов для некоторых тестовых функций, на котором используют следующие обозначения: R_m – тестовая функция $R(t)$; R_δ – численное решение задач (8 – 11).

Выводы

Рассмотрена математическая модель роста частицы в двухкомпонентном расплаве. Исходная задача сводится к системе параболических уравнений с граничными условиями Дирихле, Неймана и обычных дифференциальных уравнений, характеризующих рост включения. Для решения полученной задачи предложен численный метод, состоящий из конечно-разностных уравнений и регуляризирующих операторов, обеспечивающих устойчивость метода определения радиуса частицы. Эффективность и достаточный уровень точности метода подтверждаются результатами вычислительных экспериментов. Результаты исследований служат основой для разработки методов обработки информации, используемой при определении роста частиц.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Колмогоров А.Н. К статистической теории кристаллизации металлов // Известия АН СССР. Серия Математическая. 1937. Т. 1. № 3. С. 355 – 359.
2. Avrami M. Granulation, phase change, and microstructure kinetics of phase change III // Journal of Chemical Physics. 1941. Vol. 9. No. 2. P. 177 – 184.
3. Фольмер М. Кинетика образования новой фазы. – М.: Наука, 1986. – 208 с.
4. Shneidman V.A., Goldstein E.V. Nucleation time lag at nano-sizes // Journal of Non-Crystalline Solids. 2005. Vol. 351. No. 8. P. 1512 – 1521.



Результаты численного решения задачи роста частицы:

a и *б* – сравнение величины R_δ (---) с тестовыми значениями (—) $R(t) = R_0 + 0,02\sqrt{t}$ и график функции погрешности Δ_R ;
в и *з* – сравнения найденного радиуса R_δ (---) с тестовыми значениями (—) $R(t) = R_0 + 0,18[1 - (0,013t)^{-5}]$ и график функции погрешности Δ_R

Results of numerical solution of the particle growth problem:

a and *б* – comparison of R_δ values (---) with test values (—) $R(t) = R_0 + 0.02\sqrt{t}$ and graph of the error function Δ_R ;
в and *з* – comparison of the found radius R_δ (---) with test values (—) $R(t) = R_0 + 0.18[1 - (0.013t)^{-5}]$ and graph of the error function Δ_R

5. Wang D., Liu Y., Han Y., Zhang Y., Gao Z. Kinetic consideration for the incubation of the phase transformation and its application to the crystallization of amorphous alloy // *Applied Physics A*. 2008. Vol. 92. No. 3. P. 703 – 707.
6. Drozin A.D., Gamov P.A., Dudorov M.V., Roshchin V.E. Model for nanocrystal growth in an amorphous alloy // *Russian Metallurgy (Metally)*. 2012. Vol. 2012. No. 11. P. 1002 – 1005.
7. Drozin A.D., Yaparova N.M. Probabilistic-statistical testing method for the techniques of metallographic determination of the amount of non-metallic inclusions in metal // *Chernye Metally*. 2018. No. 8. P. 19 – 22.
8. Lipiński T., Wach A. Size of non-metallic inclusions in high-grade medium carbon steel // *Archives of Foundry Engineering*. 2012. Vol. 14. No. 4. P. 55 – 60.
9. Беляев И.В., Григорович К.В., Кользугина Н.Б., Шибяев С.С. Влияние чистоты исходных веществ на структуру и свойства постоянных магнитов // *Неорганические материалы*. 2010. Т. 46. № 3. С. 341 – 344.
10. Sadvskii V.M. Equations of the dynamics of a liquid crystal under the influence of weak mechanical and thermal perturbations // *AIP Conference Proceedings*. 2014. Vol. 1629. P. 311 – 318.
11. Kholpanov L.P., Prokudina L.A. Mathematical modeling of unstable mass transfer complicated by chemical reactions // *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2005. Vol. 39. No. 1. P. 36 – 46.
12. Izmail-Zadeh A.T., Korotkii A.I., Naimark B.M., Tsepelev I.A. Three-dimensional numerical simulation of the inverse problem of thermal convection // *Computational Mathematics and Math. Physics*. 2003. Vol. 43. No. 4. P. 587 – 599.
13. Prokudina L.A. Nonlinear development of the marangoni instability in liquid films // *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. 2016. Vol. 89. No. 4. P. 921 – 928.
14. Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1990. – 232 с.
15. Вабищевич П.Н., Самарский А.А. Разностные схемы для задач конвекции-диффузии на нерегулярных сетках // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. 2000. Т. 40. № 5. С. 726 – 739.
16. Fraćkowiak A., Botkin N.D., Ciałkowski M., Hoffmann K.-H. A fitting algorithm for solving inverse problems of heat conduction // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2010. Vol. 53. No. 9-10. P. 2123 – 2127.
17. Yaparova N.M., Shestakov A.L. Method for temperature measuring inside a cylindrical body based on surface measurements. – In: 14th IMEKO TC10 Workshop on Technical Diagnostics 2016: New Perspectives in Measurements, Tools and Techniques for Systems Reliability, Maintainability and Safety. 2016. P. 8 – 12.
18. Vasil'ev V.V., Vasilyeva M.V., Kardashevsky A.M. The numerical solution of the boundary inverse problem for a parabolic equation // *AIP Conference Proceeding*. 2016. Vol. 1773. No. 1. Article 100010.
19. Lukyanenko D.V., Shishlenin M.A., Volkov V.T. Solving of the coefficient inverse problems for a nonlinear singularly perturbed reaction-diffusion-advection equation with the final time data // *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2018. Vol. 54. P. 1339 – 1351.
20. Самарский А.А. Введение в теорию разностных схем. – М.: Наука, 1971. – 553 с.

Поступила в редакцию 22 октября 2019 г.
 После доработки 20 ноября 2019 г.
 Принята к публикации 22 ноября 2019 г.

METHOD FOR DETERMINING PARTICLE GROWTH DYNAMICS IN A TWO-COMPONENT ALLOY

N.M. Yaparova

South Ural State University (NRU), Russia, Chelyabinsk

Abstract. The paper deals with issue of particle growth in a two-component alloy. The particle is formed from the products of chemical reactions that occur at the phase boundary. Generalized mathematical model of particle growth includes diffusion equations, mass transfer equations in boundary layer, and equation characterizing change in radius of the growing particle. The paper proposes an approach that allows reduction of the initial issue to system of PDEs and ODE that describes the state of growing particle. This approach provides basis for developing numerical method for calculating radius of growing particle as a function of time, based on the obtained equations. The computational scheme involves the finite-difference analogues of equations with an additional regularizing functional that ensure stability of the method with respect to accumulated computational error. In order to verify reliability of the proposed computational scheme and to obtain experimental error estimates of numerical solutions, computational experiments were carried out. In the experiments, radius of growing particle is determined with respect to the time via the proposed method. Also, comparative analysis of the calculated radius with test values was carried out and experimental estimates of deviations of the calculated radius from the test functions were obtained. The results of the experiment presented in the work indicate sufficient accuracy of the developed numerical method.

Keywords: multicomponent alloy, particle growth, new phase formation, diffusion equation, mass transfer, numerical method, regularization, error estimate.

DOI: 10.17073/0368-0797-2020-2-135-139

REFERENCES

- Kolmogorov A.N. To statistical theory of metals crystallization. *Izvestiya AN SSSR. Seriya Matematicheskaya*. 1937, vol. 1, no. 3, pp. 355–359. (In Russ.).
- Avrami M. Granulation, phase change, and microstructure kinetics of phase change III. *Journal of Chemical Physics*. 1941, vol. 9, no. 2, pp. 177–184.
- Volmer Max. *Kinetics of Phase Formation: (Kinetik Der Phasenbildung)*. Central Air Documents, 1966, 219 p. (Russ. ed.: Volmer M. *Kinetika obrazovaniya novoi fazy*. Moscow: Nauka, 1986, 208 p.).
- Shneidman V.A., Goldstein E.V. Nucleation time lag at nanosizes. *Journal of Non-Crystalline Solids*. 2005, vol. 351, no. 8, pp. 1512–1521.
- Wang D., Liu Y., Han Y., Zhang Y., Gao Z. Kinetic consideration for the incubation of the phase transformation and its application to the crystallization of amorphous alloy. *Applied Physics A*. 2008, vol. 92, no. 3, pp. 703–707.
- Drozin A.D., Gamov P.A., Dudorov M.V., Roshchin V.E. Model for nanocrystal growth in an amorphous alloy. *Russian Metallurgy (Metally)*. 2012, vol. 2012, no. 11, pp. 1002–1005.
- Drozin A.D., Yaparova N.M. Probabilistic-statistical testing method for the techniques of metallographic determination of the amount of non-metallic inclusions in metal. *Chemnye Metally*. 2018, no. 8, pp. 19–22.
- Lipiński T., Wach A. Size of non-metallic inclusions in high-grade medium carbon steel. *Archives of Foundry Engineering*. 2012, vol. 14, no. 4, pp. 55–60.
- Belyaev I.V., Grigorovich K.V., Kol'chugina N.B., Shibaev S.S. Effect of the purity of starting materials on the structure and properties of permanent magnets. *Inorganic Materials*. 2010, vol. 46, no. 3, pp. 291–294.
- Sadovskii V.M. Equations of the dynamics of a liquid crystal under the influence of weak mechanical and thermal perturbations. *AIP Conference Proceedings*. 2014, vol. 1629, pp. 311–318.
- Kholpanov L.P., Prokudina L.A. Mathematical modeling of unstable mass transfer complicated by chemical reactions. *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*. 2005, vol. 39, no. 1, pp. 36–46.
- Izmail-Zadeh A.T., Korotkii A.I., Naimark B.M., Tsepelev I.A. Three-dimensional numerical simulation of the inverse problem of thermal convection. *Computational Mathematics and Math. Physics*. 2003, vol. 43, no. 4, pp. 587–599.
- Prokudina L.A. Nonlinear development of the marangoni instability in liquid films. *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*. 2016, vol. 89, no. 4, pp. 921–928.
- Tikhonov A.N., Goncharskii A.V., Stepanov V.V., Yagola A.G. *Chislennyye metody resheniya nekorrektnykh zadach* [Numerical methods for solving ill-posed problems]. Moscow: Nauka, 1990, 232 p. (In Russ.).
- Vabishchevich P.N., Samarskii A.A. Finite-difference schemes for convection-diffusion problems on irregular meshes. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 2000, vol. 40, no. 5, pp. 692–704.
- Frąckowiak A., Botkin N.D., Ciałkowski M., Hoffmann K.-H. A fitting algorithm for solving inverse problems of heat conduction. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2010, vol. 53, no. 9-10, pp. 2123–2127.
- Yaparova N.M., Shestakov A.L. Method for temperature measuring inside a cylindrical body based on surface measurements. In: *14th IMEKO TC10 Workshop on Technical Diagnostics 2016: New Perspectives in Measurements, Tools and Techniques for Systems Reliability, Maintainability and Safety*. 2016, pp. 8–12.
- Vasil'ev V.V., Vasilyeva M.V., Kardashevsky A.M. The numerical solution of the boundary inverse problem for a parabolic equation. *AIP Conference Proceeding*. 2016, vol. 1773, no. 1, article 100010.
- Lukyanenko D.V., Shishlenin M.A., Volkov V.T. Solving of the coefficient inverse problems for a nonlinear singularly perturbed reaction-diffusion-advection equation with the final time data. *Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation*. 2018, vol. 54, pp. 1339–1351.
- Samarskii A.A. *Vvedenie v teoriyu raznostnykh skhem* [Introduction to difference theory]. Moscow: Nauka, 1971, 553 p. (In Russ.).

Funding. The work was financially supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation as part of the basic part of the state task “Development, research and implementation of algorithms for processing data of dynamic measurements of spatially distributed objects”, TDA 8.9692.2017 / 8.9 of 02.17.2017.

Information about the author:

N.M. Yaparova, Cand. Sci. (Phys.–Math.), Assist. Professor, Head of the Chair of Computational Mathematics and High-Performance Computing (iaparovan@susu.ru)

Received October 22, 2019
Revised November 20, 2019
Accepted November 22, 2019