



# ВЕСТНИК

ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО  
ГОСУДАРСТВЕННОГО  
УНИВЕРСИТЕТА

2014  
Т. 6, № 2

ISSN 2075-809X

СЕРИЯ

«МАТЕМАТИКА.  
МЕХАНИКА.  
ФИЗИКА»

Решением ВАК России включен в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий

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

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

**Редакционная коллегия:**

д.ф.-м.н., профессор **Мирзоев А.А.** (отв. редактор),  
к.ф.-м.н., доцент **Голубев Е.В.** (отв. секретарь),  
к.ф.-м.н., профессор **Заляпин В.И.**,  
д.т.н., профессор **Чернявский А.О.**,  
д.ф.-м.н., профессор **Кундикова Н.Д.**,  
д.ф.-м.н., профессор **Ковалев Ю.М.**,  
д.ф.-м.н., профессор **Келлер А.В.**

**Редакционный совет:**

д.ф.-м.н., профессор **Менихес Л.Д.**,  
д.ф.-м.н., профессор **Карачик В.В.**,  
д.ф.-м.н., профессор **Мирзаев Д.А.**,  
д.ф.-м.н., профессор **Бескачко В.П.**,  
д.т.н., профессор **Сапожников С.Б.**,  
д.ф.-м.н., профессор **Жуковский В.И.** (Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва),  
д.ф.-м.н., профессор **Пинчук С.И.** (Университет штата Индиана, США),  
д.ф.-м.н., Ph. D., профессор **Штраус В.А.** (Университет Симона Боливара, г. Каракас, Венесуэла),  
Ph. D., профессор **Ким Кишик** (ИНА-Университет, г. Инчон, Корея),  
Ph. D., профессор **Ким Джейван** (Корейский институт передовых исследований KIAS, г. Сеул, Корея),  
Ph. D., ассистент-профессор **Пузырев Е.С.** (Университет Вандербильта, Нэшвилл, США)



# BULLETIN

OF THE SOUTH URAL  
STATE UNIVERSITY

SERIES

“MATHEMATICS.  
MECHANICS. PHYSICS”

2014  
Vol. 6, no. 2

ISSN 2075-809X

---

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

---

## South Ural State University

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

### Editorial Board

**A.A. Mirzoev**, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
**E.V. Golubev**, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
**V.I. Zalyapin**, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
**A.O. Chernyavskii**, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
**N.D. Kundikova**, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
**Yu.M. Kovalev**, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
**A.V. Keller**, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

### Editorial Council

**L.D. Menikhes**, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
**V.V. Karachik**, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
**D.A. Mirzaev**, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
**V.P. Beskachko**, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
**S.B. Sapozhnikov**, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation  
**V.I. Zhukovsky**, Moscow State University, Moscow, Russian Federation  
**S.I. Pinchuk**, Indiana University, United States of America  
**V.A. Strauss**, University of Simon Bolivar, Caracas, Venezuela  
**Kishik Kim**, INHA-University, Incheon, Korea  
**Jaewan Kim**, Korea Institute for Advanced Study KIAS, Seoul, Korea  
**E.S. Puzyrev**, Vanderbilt University, Nashville, USA

---

## СОДЕРЖАНИЕ

### Математика

МИРАСОВ В.Ф., СИДИКОВА А.И. Приближенное решение обратной граничной задачи теплообмена методом регуляризации А.Н. Тихонова.....	5
ПАТРУШЕВ А.А. Об одном случае решения в замкнутой форме краевой задачи Маркушевича для полуплоскости .....	12
УШАКОВ А.Л. Итерационная факторизация на фиктивном продолжении для численного решения эллиптического уравнения четвёртого порядка .....	17

### Механика

РОМАНОВ В.А., ТАРАНЕНКО П.А., ШАХРИНОВ В.Н. Оценка динамических свойств тележки трамвайного вагона для решения задачи виброизоляции.....	23
ТАРАНЕНКО П.А., ШАХРИНОВ В.Н., КУДРЯВЦЕВ О.А., КОЛКОТИН Д.А., ХРУЛЕВ С.А., ЕРПАЛОВ А.В. Расчетно-экспериментальный анализ собственных частот и форм элемента каркаса трамвайного вагона .....	29
ЩЕРБАКОВА А.О. Расчет деформирования геометрически нелинейной плоской конструкции из идеально пластичного материала.....	35
ЩЕРБАКОВА А.О. Тканевый композит. Оценка упругодиссипативных характеристик.....	40

### Физика

ВЕРХОВЫХ А.В., ОКИШЕВ К.Ю., МИРЗОЕВ А.А., МИРЗАЕВ Д.А. Построение атомистической модели фазовой границы перлит/цементит для <i>ab initio</i> моделирования .....	49
ЖИВУЛИН В.Е., ПЕСИН Л.А., МОРИЛОВА В.М., КОРЯКОВА О.В. Влияние термической обработки на магнитную активность продуктов химической карбонизации поливинилденфторида .....	56
СОЗЫКИН С.А., БЕСКАЧКО В.П. Эндоедральные комплексы углеродных нанотрубок с литием при конечных температурах .....	63
ШУЛЬГИНОВ А.А. Двумерная функция распределения результатов измерений гаммафона.....	68

### Краткие сообщения

БАРИНОВ А.Е., ПРОКОПОВ И.И., ТАМБОВЦЕВ В.И. Моделирование радиочастотных характеристик плазменных образований для гиперзвукового объекта в мезосфере Земли.....	72
ШАРАФУТДИНОВА А.М. Полный список полных $k$ -дуг в проективной плоскости порядка 9 над правым почти-полем для $k = 8, 9, 10$ .....	77
ШЕВЯКОВ И.А. О радиопрозрачности плазменной оболочки гиперзвукового летательного аппарата .....	80

---

## CONTENTS

### Mathematics

MIRASOV V.F., SIDIKOVA A.I. Approximate Solution of Inverse Boundary Problem for the Heat Exchange by A.N. Tikhonov's Regularization Method .....	5
PATRUSHEV A.A. One Case of Solution in a Closed Form of Markushevich Boundary Problem for Semiplane.....	12
USHAKOV A.L. Iterative Factorization on Fictitious Continuation for the Numerical Solution of Elliptic Equation of the Fourth Order .....	17

### Mechanics

ROMANOV V.A., TARANENKO P.A., SHAHRINOV V.N. Estimate of Dynamic Properties of Tram Car Bogie for the Solution of Vibration Isolation Problem .....	23
TARANENKO P.A., SHAHRINOV V.N., KUDRYAVTSEV O.A., KOLKOTIN D.A., KHRULEV S.A., ERPALOV A.V. Calculated and Experimental Analysis of Natural Frequencies and Elements Frame for Tram Car.....	29
SCHERBAKOVA A.O. Calculation of Deformation for Geometrically Nonlinear Plane Structure Made of Perfect Plastic Material.....	35
SCHERBAKOVA A.O. Elastic and Dissipative Properties Estimation for a Woven Composite.....	40

### Physics

VERKHOVYKH A.V., OKISHEV K.Yu., MIRZOEV A.A., MIRZAEV D.A. Elaboration of Atomic Model for Ab Initio Calculation of the Ferrite / Cementite Interface .....	49
ZHIVULIN V.E., PESIN L.A., MORILOVA V.M., KORYAKOVA O.V. Heat Treatment Influence on Magnetic Activity of Chemical Polyvinylidenfluoride Carbonification Products .....	56
SOZYKIN S.A., BESKACHKO V.P. Endohedral Complexes of Carbon Nanotubes with Lithium at Finite Temperature.....	63
SHULGINOV A.A. Two-Dimensional Distribution Function for the Results of Gamma Background Measuring.....	68

### Short communications

BARINOV A.E., PROKOPOV I.I., TAMBOVTSEV V.I. Modeling of Radio Frequency Characteristics of Plasma Formations for Hypersonic Object in Mesosphere of the Earth .....	72
SHARAFUTDINOVA A.M. Full List of Complete k-Arcs in the Right Nearfield Plane of Order 9 for $k = 8, 9, 10$ .....	77
SHEVYAKOV I.A. Radio Transparency of Plasma Shell for Hypersonic Aircraft .....	80

## ПРИБЛИЖЕННОЕ РЕШЕНИЕ ОБРАТНОЙ ГРАНИЧНОЙ ЗАДАЧИ ТЕПЛООБМЕНА МЕТОДОМ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ А.Н. ТИХОНОВА

**В.Ф. Мирасов<sup>1</sup>, А.И. Сидикова<sup>2</sup>**

Приведено приближенное решение задачи теплообмена методом регуляризации А.Н. Тихонова 2-го порядка, а также получена оценка погрешности этого приближенного решения.

*Ключевые слова:* операторное уравнение, регуляризация, оптимальный метод, оценка погрешности, некорректная задача.

### Введение

Хорошо известно, что обратные задачи теплообмена обладают целым рядом характерных особенностей, а их решение и практическое использование сопряжено с определенными трудностями, обусловленными с одной стороны их некорректностью, а с другой – высокими требованиями, предъявляемыми к точности решения этих задач. Однако, при надлежащей разработке теории и создании эффективных алгоритмов, методы решения обратных задач теплообмена являются достаточно эффективными и открывают новые возможности в тепловых исследованиях. Широкое практическое распространение данные задачи получили в таких отраслях науки и техники, как машиностроение, авиационная и космическая техника, энергетика, металлургия.

Настоящая статья посвящена исследованию и решению обратной граничной задачи теплообмена [1, с. 33] методом регуляризации А.Н. Тихонова 2-ого порядка [2]. Получено приближенное решение данной задачи, а также оценка погрешности приближенного решения.

### Постановка прямой задачи

Пусть тепловой процесс описывается уравнением

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}, \quad 0 < x < 1, \quad 0 < t \leq t_0, \quad (1)$$

$$u(x,0) = 0; \quad 0 \leq x \leq 1, \quad (2)$$

$$u(0,t) = h(t), \quad t \in [0, t_0], \quad (3)$$

где  $h(t) \in W_2^2[0, t_0]$ ,  $\|h(t)\|_{W_2^2}^2 = \int_0^{t_0} h^2(t) dt + \int_0^{t_0} |h''(t)|^2 dt$ ,

$$h(0) = h'(0) = h(t_0) = h'(t_0) = 0, \quad (4)$$

и

$$\int_0^{t_0} h^2(t) dt + \int_0^{t_0} |h''(t)|^2 dt \leq r_1^2, \quad (5)$$

где  $r_1$  – некоторое известное число,

$$u(1,t) = 0, \quad t \in [0, t_0]. \quad (6)$$

Рассмотрим классическое решение  $u(x,t)$  задачи (1)–(6), то есть  $u(x,t) \in C([0,1] \times [0, t_0]) \cap C^{2,1}((0,1) \times (0, t_0))$ .

Из теоремы, сформулированной в [3, с. 190], следует существование и единственность такого решения. Решение задачи (1)–(6) имеет вид

$$u(x,t) = (1-x)h(t) + \sum_{n=1}^{\infty} v_n(t) \sin \pi n x, \quad (7)$$

<sup>1</sup> Мирасов Вадим Фаритович – аспирант, кафедра Вычислительной математики, Южно-Уральский государственный университет.  
E-mail: vadim.mirasov@yahoo.com

<sup>2</sup> Сидикова Анна Ивановна – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра вычислительной математики, Южно-Уральский государственный университет.

где

$$v_n(t) = -\frac{2}{\pi n} \int_0^t e^{-(\pi n)^2(t-\tau)} h'(\tau) d\tau. \quad (8)$$

## Исследование гладкости решения $u(x, t)$

Из (8) следует, что

$$v_n(t) = \frac{2}{(\pi n)^3} [1 - e^{-(\pi n)^2 t}] h'(t). \quad (9)$$

Из формул (7) и (9) следует, что

$$u(x, t) \in C([0, 1] \times [0, t_0]). \quad (10)$$

Теперь перейдем к исследованию непрерывности функции  $u_t'(x, t)$ . Для этого продифференцируем общий член ряда (7) по  $t$

$$\left[ -\frac{2}{\pi n} \int_0^t e^{-(\pi n)^2(t-\tau)} h'(\tau) d\tau \right]'_t = 2h'(t) \frac{e^{-(\pi n)^2 t}}{\pi n} [1 - e^{-2(\pi n)^2 t}]. \quad (11)$$

Из (11) и признака Абеля следует, что для любого достаточно малого  $\varepsilon > 0$  ряд из производных сходится равномерно на прямоугольнике  $[\varepsilon, 1 - \varepsilon] \times [\varepsilon, t_0]$ .

Таким образом

$$u(x, t) \in C^{2,1}((0, 1) \times (0, t_0)), \quad (12)$$

а из (10) и (12) следует, что решение задачи (1)–(6), определяемое формулой (7), является классическим.

Из (4), (7) и (9) следует, что для любого  $x$

$$u(x, t_0) = 0. \quad (13)$$

## Постановка обратной граничной задачи

Предположим, что в постановке прямой задачи (1)–(6) функция  $h(t)$ , определяющая граничное условие (3), неизвестна и подлежит определению, потому вводится дополнительное условие

$$u(x_0, t) = f(t), \quad x_0 \in (0, 1), \quad t \in [0, t_0]. \quad (14)$$

Из (7) и (14) следует, что

$$f(t) = (1 - x_0)h(t) + \sum_{n=1}^{\infty} v_n(t) \sin \pi n x_0. \quad (15)$$

Предположим, что при  $f(t) = f_0(t)$  удовлетворяющем (15) существует решение  $h_0(t) \in W_2^2[0, t_0]$ , удовлетворяющее (4) и (5), но  $f_0(t)$  нам не известна, а вместо нее даны  $f_\delta(t) \in L_2[0, t_0]$  и число  $\delta > 0$ , такие, что

$$\int_0^{t_0} |f_\delta(t) - f_0(t)|^2 dt \leq \delta^2. \quad (16)$$

Требуется по  $f_\delta(t)$  и  $\delta$  определить приближенное решение  $h_\delta(t)$  и получить оценку  $\|h_\delta(t) - h_0(t)\|_{L_2}$ .

Введем линейный оператор  $A$ , отображающий пространство  $L_2[0, t_0]$  в  $L_2[0, t_0]$  и определяемый формулой

$$Ah(t) = -2 \int_0^t K(t, \tau) h(\tau) d\tau, \quad (17)$$

где

$$K(t, \tau) = \sum_{n=1}^{\infty} \pi n e^{-(\pi n)^2(t-\tau)} \sin \pi n x_0. \quad (18)$$

Заметим, что при условии  $h_0(t) \in W_2^2[0, t_0]$  и выполнении условия (4), обратная граничная задача (1)–(2), (5), (6), (14), (16) эквивалентна интегральному уравнению

$$Ah(t) = f(t); h(t), f(t) \in L_2[0, t_0]. \quad (19)$$

Известно, что задача решения уравнения Вольтерра первого рода в пространстве  $L_2[0, t]$  некорректна и потому для её решения используем метод регуляризации А.Н. Тихонова [2].

### Метод регуляризации А.Н. Тихонова 2-го порядка

Этот метод заключается в сведении уравнения (17)–(19) к вариационной задаче, зависящей от параметра  $\alpha > 0$ .

$$\inf\{\|Ah(t) - f_\delta(t)\|^2 + \alpha \int_0^{t_0} |h(t)|^2 dt + \alpha \int_0^{t_0} |h''(t)|^2 dt : h(t) \in W_2^2[0, t_0], h(0) = h(t_0) = 0\} \quad (20)$$

Задача (20) эквивалентна интегродифференциальному уравнению

$$A^* Ah(t) + \alpha h^{(IV)}(t) + \alpha h(t) = A^* f_\delta(t), \quad (21)$$

где  $A^*$  – оператор, сопряженный  $A$ ,  $h(t) \in W_2^4[0, t_0]$  и  $h(0) = h''(0) = h(t_0) = h''(t_0) = 0$ .

Известно (см. [2]), что для любых  $\alpha > 0$  и  $f_\delta(t) \in L_2[0, t_0]$  существует единственное решение  $h_\delta^\alpha(t)$  уравнения (21).

Значение параметра регуляризации  $\alpha = \alpha(f_\delta, \delta)$  определим из принципа невязки [4], которое определяется уравнением

$$\|Ah_\delta^\alpha(t) - f_\delta(t)\|_{L_2}^2 = \delta^2. \quad (22)$$

Известно, что при условии  $\|f_\delta(t)\|_{L_2}^2 > \delta^2$  уравнение (22) имеет единственное решение  $\alpha(f_\delta, \delta)$ .

Таким образом, приближенное решение  $h_\delta(t)$  уравнения (19) определим формулой

$$h_\delta(t) = h_\delta^{\alpha(f_\delta, \delta)}(t). \quad (23)$$

### Оценка погрешности $\|h_\delta(t) - h_0(t)\|_{L_2}$

Для оценки погрешности введем модуль непрерывности  $\omega(\delta, r_1)$

$$\omega(\delta, r_1) = \sup \left\{ \|h(t)\|_{L_2} : h(t) \in W_2^2[0, t_0], h(0) = h''(0) = h(t_0) = h''(t_0) = 0, \right. \\ \left. \int_0^{t_0} h(t)^2 dt + \int_0^{t_0} |h''(t)|^2 dt \leq r_1^2, \|Ah(t)\|_{L_2}^2 \leq \delta^2 \right\}. \quad (24)$$

В работе [5] приведено доказательство оценки

$$\|h_\delta(t) - h_0(t)\|_{L_2} \leq 2\omega(\delta, r_1), \quad (25)$$

где  $h_\delta(t)$  определена (23).

Рассмотрим расширение обратной задачи (1), (2), (5), (6), (14) на полупрямую  $[t_0, \infty)$ . Для этого введем функции  $\bar{u}(x, t)$  и  $\bar{f}(t)$ , определяемые формулами

$$\bar{u}(x, t) = \begin{cases} u(x, t); 0 \leq x \leq 1, t \in [0, t_0] \\ 0; 0 \leq x \leq 1, t > t_0 \end{cases} \quad (26)$$

и

$$\bar{f}(t) = \begin{cases} f(t); t \in [0, t_0] \\ 0; t > t_0 \end{cases}. \quad (27)$$

Из (10) и (13) следует непрерывность функций  $\bar{u}(x, t)$  и  $\bar{f}(t)$ , а из (26) следует, что функция  $\bar{u}(x, t)$  является решением задачи

$$\frac{\partial \bar{u}(x, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 \bar{u}(x, t)}{\partial x^2}, 0 < x < 1, 0 < t, \quad (28)$$

$$\bar{u}(x, 0) = 0; 0 \leq x \leq 1, \quad (29)$$

$$\bar{u}(x_0, t) = \bar{f}(t), t \geq 0, \quad (30)$$

и

$$\bar{u}(1, t) = 0; t \geq 0. \quad (31)$$

А функцию  $\bar{h}(t)$  требуется определить, причем

$$\bar{u}(0, t) = \bar{h}(t). \quad (32)$$

Обозначим через  $\bar{H}$  линейное многообразие  $L_2[0, \infty)$  такое, что  $\bar{h}(t) \in \bar{H}$  тогда и только тогда, когда

$$\bar{h}(t) = \begin{cases} h(t); 0 \leq t \leq t_0 \\ 0; t > t_0 \end{cases}, \quad (33)$$

где  $h(t)$  удовлетворяет условию (4).

Обозначим через  $\bar{A}$  линейный оператор, действующий из  $L_2[0, \infty)$  в  $L_2[0, \infty)$  и определенный на множестве  $\bar{H}$  формулой

$$\bar{A}\bar{h}(t) = \bar{f}(t), \quad (34)$$

где  $\bar{f}(t) = \bar{u}(x_0, t)$ , а  $\bar{u}(x, t)$  – решение задачи (28), (29), (31) и (32).

Для оператора  $\bar{A}$  введем модуль непрерывности  $\omega(\delta, r_1)$

$$\omega(\delta, r_1) = \sup \left\{ \|\bar{h}(t)\|_{L_2} : \bar{h}(t) \in \bar{H}, \int_0^\infty |\bar{h}(t)|^2 dt + \int_0^\infty |\bar{h}''(t)|^2 dt \leq r_1^2, \|\bar{A}\bar{h}(t)\|_{L_2}^2 \leq \delta^2 \right\} \quad (35)$$

Из (24), (33)–(35), (13) следует, что

$$\bar{\omega}(\delta, r_1) = \omega(\delta, r_1). \quad (36)$$

Для оценки сверху функций  $\bar{\omega}(\delta, r_1)$  решим задачу (28)–(31), используя преобразование Фурье по  $t$  на полупрямой  $[0, \infty)$ .

Обозначим это преобразование через  $F_t$ .

Таким образом, задачу (28)–(31) сведем к следующей

$$\frac{\partial^2 \hat{u}(x, \tau)}{\partial x^2} = i\tau \hat{u}(x, \tau); 0 < x < 1, 0 < \tau, \quad (37)$$

где  $\hat{u}(x, \tau) = F_t[\bar{u}(x, t)]$ ,

$$\bar{u}(x, \tau) = F_t[\bar{u}(x, t)], \hat{u}(1, \tau) = 0; \tau \geq 0 \quad (38)$$

$$\hat{u}(x_0, \tau) = \hat{f}(\tau); \tau \geq 0, \hat{u}(x_0, \tau) = f(\tau); \tau \geq 0 \quad (39)$$

где  $\hat{f}(\tau) = F_t[\bar{f}(t)]$ .

Решение уравнения (37) имеет вид

$$\hat{u}(x, \tau) = B(\tau)e^{\mu_0 x \sqrt{\tau}} + C(\tau)e^{-\mu_0 x \sqrt{\tau}}; \tau \geq 0, \quad (40)$$

где  $\mu_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+i)$ , а  $B(\tau)$  и  $C(\tau)$  подлежат определению.

Из (38) следует, что

$$B(\tau)e^{\mu_0 \sqrt{\tau}} + C(\tau)e^{-\mu_0 \sqrt{\tau}} = 0, \tau \geq 0. \quad (41)$$

Из (39) следует, что

$$B(\tau)e^{\mu_0 \sqrt{\tau}} + C(\tau)e^{-\mu_0 \sqrt{\tau}} = \hat{f}(\tau), \tau \geq 0. \quad (42)$$

Из (41) и (42) следует, что

$$B(\tau) = -\frac{e^{-\mu_0 \sqrt{\tau}}}{2 \operatorname{sh} \mu_0 (1-x_0) \sqrt{\tau}} \hat{f}(\tau); C(\tau) = \frac{e^{\mu_0 \sqrt{\tau}}}{2 \operatorname{sh} \mu_0 (1-x_0) \sqrt{\tau}} \hat{f}(\tau); \quad (43)$$

Из (40)–(43) следует, что

$$\hat{A} \hat{h}(\tau) = \frac{\text{sh } \mu_0 (1 - x_0) \sqrt{\tau}}{\text{sh } \mu_0 \sqrt{\tau}} \hat{h}(\tau) = \hat{f}(\tau), \quad (44)$$

где  $\hat{h}(\tau) \in F_t[\overline{H}]$ , а  $\hat{f}(\tau) \in L_2[0, \infty)$ .

Из условий (4) и (5) следует, что

$$\int_0^{\infty} \sqrt{1 + \tau^4} \hat{h}_0(\tau) d\tau \leq r_1^2. \quad (45)$$

Оператор  $\hat{A}$ , определенный (44), не меняя обозначения, продолжим на все пространство  $L_2[0, \infty)$ , т.е.

$$\hat{A} \hat{h}(\tau) = \frac{\text{sh } \mu_0 (1 - x_0) \sqrt{\tau}}{\text{sh } \mu_0 \sqrt{\tau}} \hat{h}(\tau) = \hat{f}(\tau), \quad (46)$$

где  $\hat{h}(\tau)$  и  $\hat{f}(\tau) \in L_2[0, \infty)$ .

Из (46) следует, что  $\hat{A}$  – инъективный линейный ограниченный оператор.

Соотношение (45) определяет оператор сложения  $D$ , отображающий пространство  $L_2[0, \infty)$  в  $L_2[0, \infty)$  и определяемый формулой

$$D \hat{g}(\tau) = \frac{\hat{g}(\tau)}{\sqrt{1 + \tau^4}}, \quad \tau \geq 0, \quad (47)$$

и

$$\hat{h}(\tau) = D \hat{g}(\tau). \quad (48)$$

Введем класс корректности  $\hat{M}_{r_1}$

$$\hat{M}_{r_1} = D \hat{S}_{r_1}, \quad (49)$$

где  $\hat{S}_{r_1} = \hat{S}(0, r_1)$  – шар в пространстве  $L_2[0, \infty)$  с центром в нуле радиуса  $r_1$ .

Если через  $\overline{M}_r$  обозначить подмножество  $\overline{H}$ , такое, что  $\overline{h}(t) \in M_{r_1}$

$$\int_0^{t_0} |\overline{h}(t)|^2 dt + \int_0^{t_0} |\overline{h}''(t)|^2 dt \leq r_1^2. \quad (50)$$

Из (47)–(49) и (50) следует, что

$$\hat{M}_{r_1} \supset F_t[\overline{M}_{r_1}]. \quad (51)$$

Введем модуль непрерывности  $\hat{\omega}(\delta, r_1)$  оператора  $\hat{A}$  на множестве  $\hat{M}_{r_1}$ .

$$\hat{\omega}(\delta, r_1) = \left\{ \|\hat{h}(\tau)\|_{L_2} : \hat{h}(\tau) \in \hat{M}_{r_1}, \|\hat{A} \hat{h}(\tau)\| \leq \delta \right\}. \quad (52)$$

Из (50)–(52), (35) и изометричности преобразования  $F_t$  следует, что

$$\omega(\delta, r_1) \leq \hat{\omega}(\delta, r_1) \quad (53)$$

Таким образом, из (25), (36) и (53) следует оценка

$$\|h_\delta(t) - h_0(t)\|_{L_2} \leq 2 \hat{\omega}(\delta, r_1). \quad (54)$$

Теперь перейдем к оценке функций  $\hat{\omega}(\delta, r_1)$ . Для этого оценим функцию  $\frac{|\text{sh } \mu_0 \sqrt{\tau}|}{|\text{sh } \mu_0 (1 - x_0) \sqrt{\tau}|}$ .

Так как эта функция ограничена на любом отрезке, то существует число  $r_2$ , такое, что

$$\sup_{\tau \in [0, 2]} \frac{|\operatorname{sh} \mu_0 \sqrt{\tau}|}{|\operatorname{sh} \mu_0 (1-x_0) \sqrt{\tau}|} \leq r_2, \quad (55)$$

а при  $\tau \geq 2$

$$\frac{|\operatorname{sh} \mu_0 \sqrt{\tau}|}{|\operatorname{sh} \mu_0 (1-x_0) \sqrt{\tau}|} \leq 8e^{x_0 \sqrt{\frac{\tau}{2}}}, \quad (56)$$

Определим число  $\tau_0 \geq 2$  таким образом, чтобы при  $\tau \geq \tau_0$

$$e^{x_0 \sqrt{\frac{\tau}{2}}} \geq r_2. \quad (57)$$

Из (57) следует, что при  $\tau \geq \tau_0$

$$\frac{|\operatorname{sh} \mu_0 \sqrt{\tau}|}{|\operatorname{sh} \mu_0 (1-x_0) \sqrt{\tau}|} \leq 9e^{x_0 \sqrt{\frac{\tau}{2}}}, \quad (58)$$

Так как тут  $\tau \geq \tau_0$

$$\frac{r_1}{\sqrt{2\tau^2}} \leq \frac{r_1}{\sqrt{1+\tau^4}}, \quad (59)$$

Если  $\tau_0^2 \leq e^{x_0 \sqrt{\frac{\tau_0}{2}}}$ , то из (58) и (59) следует, что если  $\bar{\tau}$  определить формулой

$$\bar{\tau} = \frac{1}{2x_0^2} \ln^2 \left( \frac{r_1}{9\delta} \right), \quad (60)$$

то из (60) следует на основании теоремы, доказанной в [6, с. 15], что при  $\bar{\tau} \geq \tau_0$

$$\hat{\omega}(\delta, r_1) \leq \frac{r_1}{\sqrt{1+\bar{\tau}^4}}, \quad (61)$$

Или, что  $\hat{\omega}(\delta, r_1) \sim \left[ \ln \left( \frac{r_1}{9\delta} \right) \right]^{-4}$ .

Таким образом, из (60), (61) и (54) следует, что при достаточно малых значениях  $\delta$  справедлива оценка

$$\|h_\delta(t) - h_0(t)\|_{L_2} \leq \frac{r_1}{\sqrt{1 + \frac{1}{16x_0^2} \left[ \ln \left( \frac{r_1}{9\delta} \right) \right]^8}}.$$

### Литература

1. Алифанов, О.М. Экстремальные методы решения некорректных задач / О.М. Алифанов, Е.А. Артюхин, С.В. Румянцев. – М.: Наука, 1988. – 287 с.
2. Тихонов, А.Н. О регуляризации некорректно поставленных задач / А.Н. Тихонов // ДАН СССР, 1963. – Т. 153, № 1. – С. 49–52.
3. Тихонов, А.Н. Уравнения математической физики / А.Н. Тихонов, А.А. Самарский // М.: Наука, 1966. – 725 с.
4. Морозов, В.А. О регуляризации некорректно поставленных задач и выборе параметра регуляризации / В.А. Морозов // ЖВМиМФ, 1966. – Т. 6, № 1. – С. 170–175.
5. Танана, В.П. Об оптимальности методов решения нелинейных неустойчивых задач / В.П. Танана // ДАН СССР, 1975. – Т. 220, № 5. – С. 1035–1037.
6. Танана, В.П. Оптимальные методы решения некорректно поставленных задач / В.П. Танана, А.И. Сидикова // Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2012. – 162 с.

*Поступила в редакцию 6 сентября 2013 г.*

## APPROXIMATE SOLUTION OF INVERSE BOUNDARY PROBLEM FOR THE HEAT EXCHANGE BY A.N. TIKHONOV'S REGULARIZATION METHOD

V.F. Mirasov<sup>1</sup>, A.I. Sidikova<sup>2</sup>

The article shows approximate solution of the heat exchange problem by A.N. Tikhonov's regularization method and the error estimate of approximate solution is given.

*Keywords: operator equation, regularity, optimal method, error estimation, ill-posed problem.*

### References

1. Alifanov O.M., Artyukhin E.A., Rumyantsev S.V. *Ekstremal'nye metody resheniya nekorrektnykh zadach* (Extreme methods of ill-posed problems solution). Moscow: Nauka Publ., 1988. 287 p. (in Russ.).
2. Tikhonov A.N. *DAN SSSR*. 1963. Vol. 153, no. 1. pp. 49–52. (in Russ.).
3. Tikhonov A.N., Samarskiy A.A. *Uravneniya matematicheskoy fiziki* (Equations of mathematical physics). Moscow: Nauka Publ, 1966. 725 p. (in Russ.).
4. Morozov V.A. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki*. 1966. Vol. 6, no. 1. pp. 170–175. (in Russ.).
5. Tanana V.P. *DAN SSSR*. 1975. Vol. 220, no. 5. pp. 1035–1037. (in Russ.).
6. Tanana V.P., Sidikova A.I. *Optimal'nye metody resheniya nekorrektno postavlennykh zadach* (Optimal methods of ill-posed problems solution). Chelyabinsk: YuUrGU Publ., 2012. 162 p. (in Russ.).

*Received 6 September 2013*

<sup>1</sup> Mirasov Vadim Faritovich is Post-graduate Student, Calculating Mathematics Department, South Ural State University.  
E-mail: vadim.mirasov@yahoo.com

<sup>2</sup> Sidikova Anna Ivanovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Calculating Mathematics Department, South Ural State University.

## ОБ ОДНОМ СЛУЧАЕ РЕШЕНИЯ В ЗАМКНУТОЙ ФОРМЕ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ МАРКУШЕВИЧА ДЛЯ ПОЛУПЛОСКОСТИ

А.А. Патрушев<sup>1</sup>

Предложен метод явного решения краевой задачи Маркушевича в постановке Л.И. Чибриковой, в классе кусочно-аналитических функций. Краевое условие задано на прямой. Получено решение в замкнутой форме при некотором ограничении, наложенном на коэффициент  $b(t)$  задачи.

*Ключевые слова:* краевые задачи для аналитических функций, краевая задача Римана, краевая задача Гильберта, краевая задача Маркушевича.

Рассмотрим трехэлементную задачу Маркушевича

$$\psi_+(t) = a(t)\psi_-(t) + b(t)\overline{\psi_+(t)} + f(t) \quad (1)$$

на вещественной прямой  $\Gamma: \operatorname{Im} z = 0$ . Здесь  $a(t), b(t), f(t) \in H(\Gamma)$  – гельдеровские функции,  $a(t) \neq 0$ ,  $t \in \Gamma$ , бесконечно удаленная точка включается в  $\Gamma$ .

Требуется найти функции  $\psi_+(z), \psi_-(z)$ , аналитические соответственно в верхней полуплоскости  $S_+$  и нижней полуплоскости  $S_-$ , непрерывно продолжимые на прямую  $\Gamma$ , если граничные значения этих функций связаны линейным соотношением (1). Решение будем искать в классе функций, исчезающих в точке  $z = -i$ , которые чаще всего требуются в приложениях.

Пусть  $\kappa = \operatorname{Ind}_{\Gamma} a(t) = \frac{1}{2\pi i} [\ln a(t)]_{-\infty}^{+\infty}$ . Так как  $a(t)$  удовлетворяет условию Гельдера в окрестности бесконечно удаленной точки, то  $a(+\infty) = a(-\infty) \neq 0$ .

Для того, чтобы привести рассматриваемую задачу к случаю конечной граничной задачи для единичной окружности, рассмотренной в статье [3], применим следующее дробно-линейное преобразование:

$$z = -i \frac{\zeta - i}{\zeta + i}, \quad \zeta = -i \frac{z - i}{z + i}. \quad (2)$$

При этом преобразовании прямая  $\Gamma$  плоскости  $z$  переходит в единичную окружность  $L: |\tau| = 1$  плоскости  $\zeta$ . Если точка  $t$  пробегает в положительном направлении прямую  $R$ , то соответствующая ей точка  $\tau$  плоскости  $\zeta$ , определяемая равенством

$$\tau = -i \frac{t - i}{t + i},$$

описывает окружность  $L$  в направлении, оставляющем слева ограниченный ею круг. Этот круг мы обозначим через  $D_+$ , а часть плоскости, внешнюю по отношению к  $D_+$ , – через  $D_-$ .

Дробно-линейное преобразование (2) конформно преобразует область  $S_+$  в область  $D_+$ , а область  $S_-$  – в область  $D_-$ ; при этом точке  $z = \infty$  соответствует точка  $\zeta = -i$ , а точке  $\zeta = \infty$  – точка  $z = -i$  [2].

Для того, чтобы не усложнять внешнего вида формул, мы будем обозначать функцию

$$\psi(z) = \psi \left( -i \frac{\zeta - i}{\zeta + i} \right)$$

просто через  $\psi(\zeta)$ ; аналогично поступаем для функций  $a(t), b(t)$  и  $f(t)$ , а также для других функций, которые нам встретятся в дальнейшем.

При этих обозначениях граничное условие (1) запишется в виде:

$$\psi_+(\tau) = a(\tau)\psi_-(\tau) + b(\tau)\overline{\psi_+(\tau)} + f(\tau), \quad \tau \in L. \quad (3)$$

Наложим следующие дополнительные ограничения на коэффициент  $b(t)$  краевой задачи (1):

<sup>1</sup> Патрушев Алексей Алексеевич – доцент, кафедра общей математики, Южно-Уральский государственный университет.  
E-mail: patraleksej@yandex.ru

а)  $b(t) \frac{\overline{a_+(t)}}{a_+(t)} + 1 \neq 0, t \in \Gamma;$

б)  $b(t) \frac{\overline{a_+(t)}}{a_+(t)} + 1$  – является краевым значением аналитической и отличной от нуля всюду в

области  $S_-$  функции, за исключением, быть может,  $z = -i$ , в которой она имеет конечный порядок  $\kappa_1$ . Здесь  $a(t) = a_+(t)t^{\kappa}a_-(t)$  – факторизация коэффициента  $a(t)$  по формулам Гахова [1].

Очевидно, что в этом случае функция  $b(\tau)$  краевой задачи (3) будет удовлетворять следующим условиям:

а)  $b_1(\tau) + 1 \neq 0 \left( b_1(\tau) = b(\tau) \frac{\overline{a_+(\tau)}}{a_+(\tau)} \right), \tau \in L;$

б)  $b_1(\tau) + 1$  – является краевым значением аналитической и отличной от нуля всюду в области  $D_-$  функции, за исключением, быть может, бесконечно удаленной точки, в которой она имеет конечный порядок  $\kappa_1$ .

Теперь мы можем воспользоваться результатами статьи [3]. В этой статье краевая задача Маркушевича для единичного круга сводится к сингулярному интегральному уравнению относительно  $\text{Re}\psi_+(\tau)$  с последующим решением задач Шварца и Гильберта в классе кусочно-аналитических функций. Общее решение неоднородной задачи Маркушевича для единичной окружности было получено в виде

$$\psi(\zeta) = \begin{cases} a_+(\zeta) \left[ \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{g(\tau)}{\tau - \zeta} d\tau + G(\zeta) + P_{\kappa_0-1}(\zeta) \right], \zeta \in D_+, \\ \frac{a_-(\zeta)(b_1(\zeta) + 1)}{\zeta^{\kappa}} \left[ \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{g(\tau)}{\tau - \zeta} d\tau + G(\xi) + P_{\kappa_0-1}(\zeta) \right], \xi \in D_-. \end{cases} \quad (4)$$

Здесь  $g(\tau) = b_1(\tau) [d + P_{\kappa_0-1}(\tau)] - \frac{ib_1(\tau)}{b_1(\tau) + 1} [F_0^-(\tau) + Q_{\kappa_1-1}(\tau) + \overline{Q_{\kappa_1-1}(\tau)}], G(\zeta) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{g_1(\tau)}{\tau - \zeta} d\tau,$

$$g_1(\tau) = \frac{b_1(\tau)}{b_1(\tau) + 1} \left[ \frac{f(\tau)}{a_+(\tau)} - iF_1^-(\tau) \right], F_0(\zeta) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \frac{c(\tau)(\tau + \zeta)}{(\tau - \zeta)\tau} d\tau, F_1(\zeta) = \frac{1}{2\pi i} \int_L \text{Im} \left\{ \frac{f(\tau)}{a_+(\tau)} \right\} \frac{\tau + \zeta}{(\tau - \zeta)\tau} d\tau,$$

$$c(\tau) = \text{Im} \left\{ (b_1(\tau) + 1) [d + P_{\kappa_0-1}(\tau)] \right\}, \kappa_0 = \text{Ind}_L \frac{\tau^{\kappa}}{b_1(\tau) + 1} = \kappa - \kappa_1, \kappa_1 = \text{Ind}_L (b_1(\tau) + 1),$$

$P_{\kappa_0-1}(\zeta), Q_{\kappa_1-1}(\xi)$  – произвольные многочлены степени не выше  $\kappa_0 - 1, \kappa_1 - 1$  соответственно.

Если  $\kappa_0 < 0$ , то появляются условия разрешимости задачи

$$\int_L \left[ \frac{2b_1(\tau) \text{Re} \phi_+(\tau)}{(b_1(\tau) + 1)} \right] \tau^{k-1} d\tau - \int_L \frac{f(\tau)}{a_+(\tau)(b_1(\tau) + 1)} \tau^{k-1} d\tau = 0, k = 1, \dots, -\kappa_0, \quad (5)$$

где

$$\begin{aligned} \text{Re} \phi_+(\tau) &= \frac{1}{2} (b_1(\tau) + 1) [d + P_{\kappa_0-1}(\tau) - \phi_1^-(\tau)] + \frac{f(\tau)}{2a_+(\tau)}, \\ -i\phi_1^-(\zeta) &= \frac{1}{b_1(\zeta) + 1} \left[ F_0(\zeta) + F_1(\zeta) + Q_{\kappa_1-1}(\zeta) + \overline{Q_{\kappa_1-1}(\zeta^*)} \right]. \end{aligned}$$

При  $\kappa_1 \leq 0$  возникают следующие условия разрешимости

$$\int_L \frac{c(\tau)}{\tau^{k+1}} d\tau = \alpha_k, \alpha_k = - \int_L \text{Im} \left\{ \frac{f(t)}{a_+(t)} \right\} \frac{d\tau}{\tau^{k+1}}, k = 0, \dots, -\kappa_1. \quad (6)$$

Если  $f(\tau) \equiv 0$ , то мы имеем однородную задачу Маркушевича. В этом случае  $G(\zeta) \equiv 0$ .

Вернемся теперь к переменной  $z$  по формуле  $\zeta = -i \frac{z-i}{z+i}$ .

Тогда общее решение неоднородной задачи Маркушевича для полуплоскости запишется в виде

$$\psi(z) = \begin{cases} a_+(z) \left[ \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(z+i)g(t)}{(t+i)t-z} dt + G(z) + P_{\kappa_0-1} \left( \frac{z-i}{z+i} \right) \right], & z \in S_+, \\ \left( -i \cdot \frac{z+i}{z-i} \right)^{\kappa} a_-(z)(b_1(z)+1) \left[ \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(z+i)g(t)}{(t+i)t-z} dt + G(z) + P_{\kappa_0-1} \left( \frac{z-i}{z+i} \right) \right], & z \in S_-. \end{cases} \quad (7)$$

Здесь 
$$g(t) = b_1(t) \left[ d + P_{\kappa_0-1} \left( \frac{t-i}{t+i} \right) \right] - \frac{ib_1(t)}{b_1(t)+1} \left[ F_0^-(t) + Q_{\kappa_1-1} \left( \frac{t-i}{t+i} \right) + \overline{Q_{\kappa_1-1} \left( \frac{t-i}{t+i} \right)} \right],$$

$$G(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{(z+i)g_1(t)}{(t+i)t-z} dt, \quad g_1(t) = \frac{b_1(t)}{b_1(t)+1} \left[ \frac{f(t)}{a_+(t)} - iF_1^-(t) \right], \quad F_0(z) = \frac{1}{\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{c(t)dt}{t-z} - \frac{1}{\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{c(t)t dt}{t^2+1},$$

$$F_1(z) = \frac{1}{\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{Im} \left\{ \frac{f(t)}{a_+(t)} \right\} \frac{dt}{t-z} - \frac{1}{\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \operatorname{Im} \left\{ \frac{f(t)}{a_+(t)} \right\} \frac{t dt}{t^2+1}, \quad c(t) = \operatorname{Im} \left\{ (b_1(t)+1) \left[ d + P_{\kappa_0-1} \left( \frac{t-i}{t+i} \right) \right] \right\},$$

$P_{\kappa_0-1} \left( \frac{z-i}{z+i} \right), Q_{\kappa_1-1} \left( \frac{z-i}{z+i} \right)$  – произвольные полиномы относительно  $\left( \frac{z-i}{z+i} \right)$  степени не выше

$\kappa_0 - 1, \kappa_1 - 1$  соответственно.

Условия разрешимости (5), (6) запишутся, соответственно, в виде:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left[ \frac{2b_1(t) \operatorname{Re} \phi_+(t)}{(b_1(t)+1)} \right] \left( \frac{t-i}{t+i} \right)^{\kappa-1} \frac{dt}{(t+i)^2} - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{f(t)}{a_+(t)(b_1(t)+1)} \left( \frac{t-i}{t+i} \right)^{\kappa-1} \frac{dt}{(t+i)^2} = 0, \quad k = 1, \dots, -\kappa_0, \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} \operatorname{Re} \phi_+(t) &= \frac{1}{2}(b_1(t)+1) \left[ d + P_{\kappa_0-1} \left( \frac{t-i}{t+i} \right) - \phi_1^-(t) \right] + \frac{f(t)}{2a_+(t)}, \\ -i\phi_1^-(z) &= \frac{1}{b_1(z)+1} \left[ F_0(z) + F_1(z) + Q_{\kappa_1-1} \left( \frac{z-i}{z+i} \right) + \overline{Q_{\kappa_1-1} \left( \frac{\bar{z}-i}{\bar{z}+i} \right)} \right]; \\ \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{t+i}{t-i} \right)^{\kappa+1} \cdot \frac{c(t)dt}{(t+i)^2} &= \alpha_k, \quad \alpha_k = - \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{t+i}{t-i} \right)^{\kappa+1} \operatorname{Im} \left\{ \frac{f(t)}{a_+(t)} \right\} \frac{dt}{(t+i)^2}, \quad k = 0, \dots, -\kappa_1. \end{aligned} \quad (9)$$

Результаты статьи [3] позволяют сформулировать следующие теоремы.

**Теорема 1.** Пусть коэффициенты однородной задачи Маркушевича (1) ( $f(t) \equiv 0$ )  $a(t), b(t) \in H(\Gamma), a(t) \neq 0, t \in \Gamma, \kappa = \operatorname{Ind}_{\Gamma} a(t)$ , а также функция  $b_1(t)+1$  является краевым значением функции на прямой  $\Gamma$ , аналитической и отличной от нуля всюду в области  $S_- \cup \Gamma$ , за исключением, быть может, точки  $z = -i$ , в которой она может иметь конечный порядок  $\kappa_1, \kappa_0 = \kappa - \kappa_1$ .

Тогда однородная задача (1) ( $f(t) \equiv 0$ ) в классе кусочно-аналитических функций, исчезающих в точке  $z = -i$ :

1) при  $\kappa_1 > 0, \kappa_0 \geq 0$ , имеет общее решение, определяемое формулой (7) ( $G(z) \equiv 0$ ), которое линейно зависит от  $2\kappa_0 + 2\kappa_1 = 2\kappa$  произвольных вещественных произвольных постоянных;

2) при  $\kappa_1 > 0, \kappa_0 < 0$ , общее решение задается формулой (7)  $\left( G(z) \equiv 0, P_{\kappa_0-1} \left( \frac{z-i}{z+i} \right) \equiv 0 \right)$ , которое содержит  $2\kappa_1 - r_1$  произвольных вещественных постоянных,  $r_1$  – ранг матрицы коэффициентов однородной системы (8) (если  $r_1 = 2\kappa_1$ , то задача имеет только тривиальное решение);

3) при  $\kappa_1 \leq 0$ ,  $\kappa_0 \geq 0$ , имеет общее решение, определяемое формулой (7)  $\left( G(z) \equiv 0, Q_{\kappa_1-1} \left( \frac{z-i}{z+i} \right) \equiv 0 \right)$ , которое содержит  $2\kappa_0 - r$  произвольных вещественных постоянных,  $r$  – ранг матрицы коэффициентов однородной системы (9) (если  $r = 2\kappa_0$  то задача, отличного от тривиального, решения не имеет);

4) при  $\kappa_1 \leq 0$ ,  $\kappa_0 < 0$ , если функция  $b_1(t)+1$  удовлетворяет условиям (9) ( $f(t) \equiv 0$ ) и условиям (8) ( $f(t) \equiv 0$ ), имеет одномерное пространство решений, определяемое формулой (7)  $\left( G(z) \equiv 0, P_{\kappa_0-1} \left( \frac{z-i}{z+i} \right) \equiv 0, Q_{\kappa_1-1} \left( \frac{z-i}{z+i} \right) \equiv 0 \right)$ ; в противном случае имеет только тривиальное решение.

**Теорема 2.** Пусть коэффициенты неоднородной задачи Маркушевича  $a(t), b(t) \in H(\Gamma)$ , функция  $f(t) \in H(\Gamma)$ ,  $a(t) \neq 0$ ,  $t \in \Gamma$ , а также функция  $b_1(t)+1$  является краевым значением на прямой  $\Gamma$  функции, аналитической и отличной от нуля всюду в области  $S_- \cup \Gamma$ , за исключением, быть может, точки  $z = -i$ , в которой она может иметь конечный порядок  $\kappa_1$ .

Тогда неоднородная задача в классе кусочно-аналитических функций, исчезающих в точке  $z = -i$ :

1) при  $\kappa_1 > 0$ ,  $\kappa_0 \geq 0$  имеет общее решение, определяемое формулой (7), которое линейно зависит от  $2\kappa$  произвольных вещественных постоянных;

2) при  $\kappa_1 > 0$ ,  $\kappa_0 < 0$  общее решение задается формулой (7)  $\left( P_{\kappa_0-1} \left( \frac{z-i}{z+i} \right) \equiv 0 \right)$ , если выполняются  $-\kappa_0 - r_1$  условий разрешимости, выписанных явно ( $r_1$  – ранг матрицы коэффициентов системы (8)), которое содержит  $2\kappa_1 - 2r_1$  произвольных вещественных постоянных (если  $r_1 = \kappa_1$ , решение будет единственным);

3) при  $\kappa_1 \leq 0$ ,  $\kappa_0 \geq 0$  имеет общее решение, определяемое формулой (7)  $\left( Q_{\kappa_1-1} \left( \frac{z-i}{z+i} \right) \equiv 0 \right)$ , если выполняются  $-\kappa_1 + 1 - r$  условий разрешимости, выписанных явно ( $r$  – ранг матрицы коэффициентов системы (9)), которое линейно зависит от  $2\kappa_0 - 2r$  произвольных вещественных постоянных (при  $r = \kappa_0$  решение будет единственным);

4) при  $\kappa_1 \leq 0$ ,  $\kappa_0 < 0$  имеет единственное решение, определяемое формулой (7)  $\left( P_{\kappa_0-1} \left( \frac{z-i}{z+i} \right) \equiv 0, Q_{\kappa_1-1} \left( \frac{z-i}{z+i} \right) \equiv 0 \right)$ , тогда и только тогда, когда выполняются  $-\kappa_1 + 1$  условий разрешимости (9), и  $-\kappa_0$  условий разрешимости (8).

### Литература

1. Гахов, Ф.Д. Краевые задачи / Ф.Д. Гахов. – М.: Физматгиз, 1963. – 640 с.
2. Мусхелишвили, Н.И. Сингулярные интегральные уравнения / Н.И. Мусхелишвили. – М.: Наука, 1968. – 542 с.
3. Патрушев, А.А. Один из случаев решения задачи Маркушевича в замкнутой форме / А.А. Патрушев, Е.В. Патрушева // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Т. 5, № 1. – С. 63–69.

Поступила в редакцию 8 декабря 2013 г.

## ONE CASE OF SOLUTION IN A CLOSED FORM OF MARKUSHEVICH BOUNDARY PROBLEM FOR SEMIPLANE

**A.A. Patrushev<sup>1</sup>**

In the article an explicit method for the solution of Markushevich boundary value problem directed by L.I. Chibrikova in the class of piecewise analytic functions is given. Boundary condition of the problem is given on the line. The problem is found in a closed form under certain constraints on the coefficient  $b(t)$  of the problem.

*Keywords: boundary problems for analytic functions, Riemann boundary problem, Hilbert boundary problem, Markushevich boundary problem.*

### References

1. Gakhov F.D. *Kraevye zadachi* (Boundary value problems). Moscow: Fizmatgiz Publ., 1963. 640 p. (in Russ.).
2. Muskhelishvili N.I. *Singulyarnye integral'nye uravneniya* (Singular integral equations). Moscow: Nauka, 1968. 542 p.
3. Patrushev A.A., Patrusheva E.V. Odin iz sluchaev resheniya zadachi Markushevicha v zamknutoy forme (A variant of the solution of Markushevich boundary problem). *Vestnik YuUrGU. Seriya "Matematika. Mekhanika. Fizika"*. 2013. Vol. 5, no. 1. pp. 63–69. (in Russ.).

*Received 8 December 2013*

---

<sup>1</sup> Patrushev Alexey Alexeevich is Associate Professor, Department of General Mathematics, South Ural State University.  
E-mail: patraleksej@yandex.ru

# ИТЕРАЦИОННАЯ ФАКТОРИЗАЦИЯ НА ФИКТИВНОМ ПРОДОЛЖЕНИИ ДЛЯ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ ЧЕТВЁРТОГО ПОРЯДКА

А.Л. Ушаков<sup>1</sup>

Рассматривается эллиптическое дифференциальное уравнение четвёртого порядка при смешанных краевых условиях. Его численное решение с помощью итерационной факторизации на фиктивном продолжении сводится к решению систем линейных алгебраических уравнений с треугольными матрицами, в которых количество ненулевых элементов в каждой строке не более трёх.

*Ключевые слова:* итерационная факторизация, фиктивное продолжение.

## Введение

Рассматривается эллиптическое дифференциальное уравнение четвёртого порядка в прямоугольнике со сторонами, параллельными осям координат, на двух смежных сторонах прямоугольника заданы условия шарнирного опирания, а на остальной части границы условия симметрии. Для дискретного аналога этого уравнения в виде систем линейных алгебраических уравнений приводится факторизованный предобуславливатель квадратно попеременно треугольного вида. Исходная задача может быть получена в методах типа фиктивных компонент при решении эллиптических дифференциальных уравнений четвёртого порядка в плоских областях достаточно произвольного вида при однородных главных или естественных краевых условиях.

## Малые деформации тонких пластин на упругом основании

Из линейной теории изгиба тонких пластин на упругом основании, основываясь на [1, 2] энергия деформированной пластины может быть записана в виде

$$E(\tilde{u}) = \frac{1}{2} D \int_{\Omega} ((\Delta \tilde{u})^2 + 2(1 - \sigma)(\tilde{u}_{xy}^2 - \tilde{u}_{xx}\tilde{u}_{yy})) d\Omega + \frac{1}{2} \int_{\Omega} K \tilde{u}^2 d\Omega - \int_{\Omega} \tilde{P} \tilde{u} d\Omega,$$

где  $\tilde{P}$  – давление,  $K$  – коэффициент жёсткости упругого основания ( $K \equiv 0$  в случае отсутствия упругого основания),  $D = Eh^3 / (12(1 - \sigma^2))$  – цилиндрическая жёсткость пластины,  $h$  – толщина пластины,  $E$  – модуль Юнга (модуль растяжения),  $\sigma$  – коэффициент Пуассона (отношение поперечного сжатия к продольному растяжению),  $\Omega$  – плоская область,  $\tilde{u}$  – искомое смещение. Если приравнять к нулю вариацию энергии

$$\delta E(\tilde{u}) = D \int_{\Omega} (\Delta \tilde{u} \Delta \tilde{v} + (1 - \sigma)(2\tilde{u}_{xy}\tilde{v}_{xy} - \tilde{u}_{xx}\tilde{v}_{yy} - \tilde{u}_{yy}\tilde{v}_{xx})) d\Omega + \int_{\Omega} K \tilde{u} \tilde{v} d\Omega - \int_{\Omega} \tilde{P} \tilde{v} d\Omega = 0,$$

где  $\tilde{v} = \delta \tilde{u}$ , то при  $a = K/D$ ,  $\tilde{f} = \tilde{P}/D$  получается, что

$$\int_{\Omega} (\sigma \Delta \tilde{u} \Delta \tilde{v} + (1 - \sigma)(\tilde{u}_{xx}\tilde{v}_{xx} + 2\tilde{u}_{xy}\tilde{v}_{xy} + \tilde{u}_{yy}\tilde{v}_{yy})) + a \tilde{u} \tilde{v} d\Omega = \int_{\Omega} \tilde{f} \tilde{v} d\Omega.$$

После интегрирования по частям устанавливается

$$\int_{\Omega} (\Delta^2 \tilde{u} + a \tilde{u}) \tilde{v} d\Omega + \int_s l_1 \tilde{u} \frac{\partial \tilde{v}}{\partial n} ds - \int_s l_2 \tilde{u} \tilde{v} ds = \int_{\Omega} \tilde{f} \tilde{v} d\Omega,$$

где

$$l_1 \tilde{u} = \Delta \tilde{u} + (1 - \sigma) n_1 n_2 \tilde{u}_{xy} - n_2^2 \tilde{u}_{xx} - n_1^2 \tilde{u}_{yy},$$

$$l_2 \tilde{u} = \frac{\partial \Delta \tilde{u}}{\partial n} + (1 - \sigma) \frac{\partial}{\partial s} (n_1 n_2 (\tilde{u}_{yy} - \tilde{u}_{xx})) + (n_1^2 - n_2^2) \tilde{u}_{xy},$$

$s = \partial \Omega$ ,  $n_1 = -\cos(n, x)$ ,  $n_2 = -\cos(n, y)$ .

<sup>1</sup> Ушаков Андрей Леонидович – старший преподаватель, кафедра дифференциальных и стохастических уравнений, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: ushakov\_al@inbox.ru

## Математика

Таким образом, возможно рассмотрение краевых условий жёсткой заделки, шарнирного опирания, симметрии и свободного опирания в отдельном или смешанном виде.

### Непрерывная рассматриваемая задача в вариационной и классической постановках

Рассматривается задача

$$\tilde{u}_1 \in \tilde{V}_1 : \Lambda(\tilde{u}_1, \tilde{v}_1) = \tilde{g}_1(\tilde{v}_1) \quad \forall \tilde{v}_1 \in \tilde{V}_1, \quad \tilde{g}_1 \in \tilde{V}'_1, \quad (1)$$

где соболевское пространство функций

$$\tilde{V}_1 = \tilde{V}_1(\Omega) = \left\{ \tilde{v}_1 \in W_2^2(\Omega) : \tilde{v}_1|_{\Gamma_1} = 0, \frac{\partial \tilde{v}_1}{\partial n}|_{\Gamma_2} = 0 \right\}$$

на области  $\Omega = (0; b_1) \times (0; b_2)$ , с границами  $\Gamma_1 = \{b_1\} \times [0; b_2] \cup [0; b_1] \times \{b_2\}$ ,  $\Gamma_2 = \Gamma \setminus \Gamma_1$ ,  $\Gamma = \partial\Omega$ , билинейная форма

$$\Lambda(\tilde{u}_1, \tilde{v}_1) = \int_{\Omega} (\sigma \Delta \tilde{u}_1 \Delta \tilde{v}_1 + (1 - \sigma)(\tilde{u}_{kx} \tilde{v}_{kx} + 2\tilde{u}_{ky} \tilde{v}_{ky} + \tilde{u}_{yy} \tilde{v}_{yy})) + a\tilde{u}_1 \tilde{v}_1 d\Omega,$$

при этом  $a = a_1$  на области  $\Omega_1$ ,  $a = a_2$  на  $\Omega \setminus \Omega_1$ , области  $\Omega_1, \Omega_2 : \bar{\Omega} = \bar{\Omega}_1 \cup \bar{\Omega}_2$ ,  $\Omega_1 \cap \Omega_2 = \emptyset$ ,  $\partial\Omega_1 \cap \partial\Omega_2 \neq \emptyset$ , заданы константы  $\sigma \in (0; 1)$ ,  $b_1, b_2 \in (0; +\infty)$ ,  $a_1, a_2 \in [0; +\infty)$ ,  $a_1 \leq a_2$ .

Можно отметить, что

$$\exists c_1, c_2 \in (0; +\infty) : c_1 \|\tilde{v}_1\|_{W_2^2(\Omega)}^2 \leq \Lambda(\tilde{v}_1, \tilde{v}_1) \leq c_2 \|\tilde{v}_1\|_{W_2^2(\Omega)}^2 \quad \forall \tilde{v}_1 \in \tilde{V}_1,$$

а, следовательно, решение задачи (1) существует и единственно. Если  $\tilde{u}_1$  – искомая, а  $\tilde{f}_1$  – заданная достаточно гладкая функция и

$$\tilde{g}_1(\tilde{v}_1) = (\tilde{f}_1, \tilde{v}_1), \quad \text{где } (\tilde{f}_1, \tilde{v}_1) = \int_{\Omega} \tilde{f}_1 \tilde{v}_1 d\Omega,$$

то из задачи (1) получается неоднородное бигармоническое уравнение со свободным членом при смешанных и однородных краевых условиях

$$\Delta^2 \tilde{u}_1 + a\tilde{u}_1 = \tilde{f}_1, \quad \tilde{u}_1|_{\Gamma_1} = \Delta \tilde{u}_1|_{\Gamma_1} = 0, \quad \frac{\partial \tilde{u}_1}{\partial n}|_{\Gamma_2} = \frac{\partial \Delta \tilde{u}_1}{\partial n}|_{\Gamma_2} = 0. \quad (2)$$

### Дискретная аппроксимация рассматриваемой задачи

Производится дискретизация задачи (1) по методу конечных элементов на параболических восполнениях:

$$\tilde{u}_1 \in \tilde{V}_1 \subset \tilde{V}'_1 : \Lambda(\tilde{u}_1, \tilde{v}_1) = \tilde{g}_1(\tilde{v}_1) \quad \forall \tilde{v}_1 \in \tilde{V}_1 \subset \tilde{V}'_1. \quad (3)$$

Рассматривается система линейных алгебраических уравнений, соответствующая задаче (3):

$$\bar{u}_1 \in \mathbb{R}^N : \Lambda \bar{u}_1 = \bar{g}_1, \quad \bar{g}_1 \in \mathbb{R}^N, \quad (4)$$

где  $\bar{v}_1 \in \mathbb{R}^N : \bar{v}_1 = (v_{1,1}, \dots, v_{1,N})'$ ,  $N = m \cdot n$ ,  $m, n \in \mathbb{N}$ , а  $v_{1,n(i-1)+j} = v_{1,i,j}$ ,  $i = 1, \dots, m$ ,  $j = 1, \dots, n$ , и  $v_{1,i,j}$  являются значениями функции дискретного аргумента соответствующего узлам сетки  $(x_i, y_j) = ((i-0,5)h_1, (j-0,5)h_2)$ ,  $i, j \in \mathbb{Z}$ , шаги сетки  $h_1 = b_1/(m+0,5)$ ,  $h_2 = b_2/(n+0,5)$ , состоящей из указанных выше узлов, а матрицы  $\Lambda$  размерности  $N \times N$ , определяются следующим образом:

$$\langle \Lambda \bar{u}_1, \bar{v}_1 \rangle = \Lambda(\tilde{u}_1, \tilde{v}_1) \quad \forall \tilde{u}_1, \tilde{v}_1 \in \tilde{V}_1 \subset \tilde{V}'_1,$$

здесь  $\langle \dots \rangle$  – скалярное произведение векторов следующего вида:

$$\langle \bar{u}_1, \bar{v}_1 \rangle = (\bar{u}_1, \bar{v}_1) h_1 h_2 = \sum_{k=1}^N u_{1,k} v_{1,k} h_1 h_2 \quad \forall \bar{u}_1, \bar{v}_1 \in \mathbb{R}^N,$$

а подпространство  $\tilde{V}_1 \subset \tilde{V}'_1$  определяется так, что

$$\tilde{V}_1 = \left\{ \tilde{v}_1 : \tilde{v}_1 = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n v_{1,i,j} \Phi^{i,j}(x, y), v_{1,i,j} \in \mathbb{R}, \right\},$$

где базисные функции

$$\Phi^{i,j}(x,y) = \Psi_{1,i}(x)\Psi_{2,j}(y), \quad \Psi_{1,i}(x) = E(1/i)\Psi(x/h_1 - i + 3) + \Psi(x/h_1 - i + 2) - E(i/m)\Psi(x/h_1 - i), \\ \Psi_{2,j}(y) = E(1/j)\Psi(y/h_2 - j + 3) + \Psi(y/h_2 - i + 2) - E(j/n)\Psi(y/h_2 - j), \quad i=1,\dots,m, \quad j=1,\dots,n,$$

$$\Psi(z) = \begin{cases} 0,5z^2, & z \in [0;1], \\ -z^2 + 3z - 1,5, & z \in [1;2], \\ 0,5z^2 - 3z + 4,5, & z \in [2;3], \end{cases}$$

$\Psi(z) = 0, z \notin [0;3], E(\cdot)$  – функция целая часть числа, компоненты вектора  $\bar{g}_1$  определяются следующим образом:

$$g_{1,n(i-1)+j} = g_{1,i,j} = h_1^{-1}h_2^{-1}g_1(\Phi^{i,j}(x,y)), \quad i=1,\dots,m, \quad j=1,\dots,n, \text{ т.е. } \langle \bar{g}_1, \bar{v}_1 \rangle = \hat{g}_1(\tilde{v}_1), \quad \forall \tilde{v}_1 \in \tilde{V}_1.$$

Отметим, что решение задачи (4), как и (3) существует, единственно и известны оценки типа

$$1. \|\tilde{u}_1 - \tilde{u}_1\|_{W_2^k(\Omega)} \leq c |\bar{h}|^{s-k} \|\tilde{u}_1\|_{W_2^s(\Omega)}, \\ 2. \lim_{\bar{h} \rightarrow 0} \|\tilde{u}_1 - \tilde{u}_1\|_{W_2^2(\Omega)} = 0, \quad \bar{h} = (h_1, h_2), \quad |\bar{h}| = \max\{h_1, h_2\}.$$

### Фиктивное продолжение дискретной решаемой задачи и её решения

Выбирается фиктивное продолжение дискретной решаемой задачи из (4)

$$\bar{u} \in \mathbb{R}^{2N} : \hat{D}\bar{u} = \bar{g}, \quad \bar{g} \in \mathbb{R}^{2N}, \quad \bar{g}_2 = \bar{0}, \quad (5)$$

где векторы

$$\bar{v} \in \mathbb{R}^{2N} : \bar{v} = (\bar{v}'_1, \bar{v}'_2)',$$

блочная, нижнетреугольная матрица  $D$  размерности  $2N \times 2N$  такова, что

$$\hat{D}_{11} = \Lambda, \quad \hat{D}_{12} = 0, \quad \hat{D}_{21} = \theta_A, \quad \hat{D}_{22} = M_\theta,$$

матрицы

$$\theta_A = A\theta + \theta A, \quad M_\theta = A^2 - \theta^2, \quad \theta = \nabla_x' \nabla_y - \nabla_y' \nabla_x, \quad A = \nabla_x' \nabla_x + \nabla_y' \nabla_y,$$

а матрицы  $\nabla_x, \nabla_y$  размерности  $N \times N$  определяются следующим образом ( $\alpha=1,2$ ):

$$\langle \nabla_x \bar{u}_\alpha, \bar{v}_\alpha \rangle = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (-u_{\alpha,i+1,j} - u_{\alpha,i,j}) h_1^{-1} v_{\alpha,i,j} h_1 h_2, \quad u_{\alpha,m+1,j} = v_{\alpha,m+1,j} = 0, \quad j=1,\dots,n,$$

$$\langle \nabla_y \bar{u}_\alpha, \bar{v}_\alpha \rangle = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (-u_{\alpha,i,j+1} - u_{\alpha,i,j}) h_2^{-1} v_{\alpha,i,j} h_1 h_2, \quad u_{\alpha,i,n+1} = v_{\alpha,i,n+1} = 0, \quad i=1,\dots,m.$$

Введём подпространства векторов:

$$\bar{V}_1 = \left\{ \bar{v} = (\bar{v}'_1, \bar{v}'_2)' \in \mathbb{R}^{2N} : \theta_A \bar{v}_1 + M_\theta \bar{v}_2 = \bar{0} \right\}, \quad \bar{V}_2 = \left\{ \bar{v} = (\bar{v}'_1, \bar{v}'_2)' \in \mathbb{R}^{2N} : \bar{v}_1 = \bar{0} \right\}.$$

Утверждение 1. Решение задачи из (5)  $\bar{u} = (\bar{u}'_1, \bar{u}'_2)' \in \bar{V}_1$  существует, единственно и  $\bar{u}_1$  – решение задачи из (4).

### Итерационная факторизация на фиктивном продолжении дискретной решаемой задачи

Определим блочную матрицу  $\hat{C}$  размерности  $2N \times 2N$  такую, что

$$\hat{C}_{11} = \hat{C}_{22} = M_\theta, \quad \hat{C}_{12} = -\theta_A, \quad \hat{C}_{21} = \theta_A.$$

Для решения задач из (5) предлагается итерационный процесс:

$$\bar{u}^k \in \mathbb{R}^{2N} : \hat{C}(\bar{u}^k - \bar{u}^{k-1}) = -\tau_k (\hat{D}\bar{u}^{k-1} - \bar{g}), \quad \tau_k > 0, \quad k \in \mathbb{N} \quad \forall \bar{u}^0 \in \bar{V}_1. \quad (6)$$

Заметим, что в итерационном процессе из (6) возникают задачи с факторизованным оператором следующего вида:

$$\bar{U} \in \mathbb{C}^N : (LL^*)^2 \bar{U} = \bar{G}, \quad \bar{G} \in \mathbb{C}^N,$$

при этом возможно расщепление на более простые задачи

$$\bar{H} \in \mathbb{C}^N, \quad L\bar{H} = \bar{G}, \quad \bar{G} \in \mathbb{C}^N, \\ \bar{W} \in \mathbb{C}^N, \quad L^*\bar{W} = \bar{H}, \quad \bar{H} \in \mathbb{C}^N,$$

$$\begin{aligned}\bar{Q} \in \mathbb{C}^N, L\bar{Q} = \bar{W}, \bar{W} \in \mathbb{C}^N, \\ \bar{U} \in \mathbb{C}^N, L^*\bar{U} = \bar{Q}, \bar{Q} \in \mathbb{C}^N,\end{aligned}$$

где матрицы  $L$  и  $L^*$  удовлетворяют следующим соотношениям ( $\dot{e}^2 = -1$ ):

$$\begin{aligned}L = \nabla_x' - \dot{e}\nabla_y', L^* = \bar{L}' = \nabla_x + \dot{e}\nabla_y, LL^* = (\nabla_x' - \dot{e}\nabla_y')(\nabla_x + \dot{e}\nabla_y) = A + \dot{e}\theta, \\ (LL^*)^2 = (A + \dot{e}\theta)^2 = M_\theta + \dot{e}\theta_A,\end{aligned}$$

тогда

$$(M_\theta + \dot{e}\theta_A)(\bar{u}_1 + \dot{e}\bar{u}_2) = \bar{g}_1 + \dot{e}\bar{g}_2,$$

что равносильно системе:

$$\begin{cases} M_\theta\bar{u}_1 - \theta_A\bar{u}_2 = \bar{g}_1, \bar{u}_1 + \dot{e}\bar{u}_2 = \bar{U}, \\ \theta_A\bar{u}_1 + M_\theta\bar{u}_2 = \bar{g}_2, \bar{g}_1 + \dot{e}\bar{g}_2 = \bar{G} \end{cases}$$

и действительно на каждом шаге итерационных процессов из (6) возникают задачи типа

$$\hat{C}\bar{u} = \bar{g}, \bar{u} = (\bar{u}'_1, \bar{u}'_2)', \bar{g} = (\bar{g}'_1, \bar{g}'_2)'$$

Утверждение 2. Если в итерационном процессе из (6)  $\exists k \in \mathbb{N} : \bar{u}^{k-1} = \bar{u}$ , то и  $\bar{u}^k = \bar{u}$ .

Пусть  $\bar{u}^k = \bar{u} + \bar{\psi}^k, \forall k \in \mathbb{N} \cup \{0\}$ .

Утверждение 3. Для итерационного процесса из (6) выполняется

$$\theta_A\bar{\psi}_1^k + M_\theta\bar{\psi}_2^k = (1 - \tau_k)(\theta_A\bar{\psi}_1^{k-1} + M_\theta\bar{\psi}_2^{k-1}), \forall k \in \mathbb{N}, \bar{\psi}^k \in \bar{V}_1, \forall k \in \mathbb{N} \cup \{0\}.$$

Замечание 1. Имеют место неравенства

$$\exists c_1, c_2 \in (0; +\infty) : c_1 M_\theta \leq \Lambda \leq c_2 M_\theta \quad [3, 4].$$

Утверждение 4. Имеет место равенство

$$\langle \hat{C}\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle = \langle M_\theta\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle - \langle M_\theta\bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle \quad \forall \bar{\psi} \in \bar{V}_1,$$

где также  $\langle \bar{u}, \bar{v} \rangle = (\bar{u}, \bar{v})h_1h_2 = \sum_{k=1}^{2N} u_k v_k h_1 h_2 \quad \forall \bar{u}, \bar{v} \in \mathbb{R}^{2N}$ .

Доказательство. Учитывая, что

$$\theta_A\bar{\psi}_1 + M_\theta\bar{\psi}_2 = \bar{0}, \theta'_A = -\theta_A,$$

получается

$$\begin{aligned}\langle \hat{C}\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle &= \langle M_\theta\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle - \langle \theta_A\bar{\psi}_2, \bar{\psi}_1 \rangle = \langle M_\theta\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle + \\ &+ \langle \bar{\psi}_2\theta_A\bar{\psi}_1 \rangle = \langle M_\theta\bar{\psi}_1\bar{\psi}_1 \rangle - \langle M_\theta\bar{\psi}_2\bar{\psi}_2 \rangle.\end{aligned}$$

Предположение 1. (О фиктивном продолжении действительной части на мнимую часть) Имеет место неравенство

$$\exists \alpha_2 \in (0; 1) : \langle M_\theta\bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle \leq \alpha_2 \langle M_\theta\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle \quad \forall \bar{\psi} \in \bar{V}_1.$$

Можно отметить ( $\gamma = (1 - \alpha_2)^{-1}$  или  $\alpha_2 = 1 - \gamma^{-1}$ ), что

$$\exists \gamma \in (1; +\infty) : \langle M_\theta\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle \leq \gamma \langle \hat{C}\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle = \gamma (\langle M_\theta\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle - \langle M_\theta\bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle) \quad \forall \bar{\psi} \in \bar{V}_1,$$

т.к. матрица  $M_\theta > 0$  потому, что  $\forall \bar{\psi}_1 \neq \bar{0}$

$$\langle M_\theta\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle = \langle (A^2 - \theta^2)\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle = \langle A^2\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle - \langle \theta^2\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle = \langle A\bar{\psi}_1, A\bar{\psi}_1 \rangle + \langle \theta\bar{\psi}_1, \theta\bar{\psi}_1 \rangle > 0$$

и матрица  $\hat{C} > 0$ , в нашем случае при  $\bar{\psi} \in \bar{V}_1$ , т.к. выводится, что

$$\begin{aligned}\langle \hat{C}\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle &= (M_\theta\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1) - (\theta_A\bar{\psi}_2, \bar{\psi}_1) = ((A^2 - \theta^2)\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1) - ((A\theta + \theta A)\bar{\psi}_2, \bar{\psi}_1) = \\ &= (A\bar{\psi}_1)^2 + (\theta\bar{\psi}_1)^2 - (\theta\bar{\psi}_2, A\bar{\psi}_1) + (A\bar{\psi}_2, \theta\bar{\psi}_1) = (A\bar{\psi}_1 - \theta\bar{\psi}_2)^2 + (A\bar{\psi}_2 + \theta\bar{\psi}_1)^2 > 0, \quad \forall \bar{\psi} \neq \bar{0},\end{aligned}$$

последнее потому, что  $(\nabla_x' - \dot{e}\nabla_y')(\nabla_x + \dot{e}\nabla_y)(\bar{\psi}_1 + \dot{e}\bar{\psi}_2) \neq \bar{0} \quad \forall \bar{\psi} \neq \bar{0}$ .

Также можно отметить, что для  $\bar{\psi} \in \bar{V}_1$ , т.е. для функций из соответствующего подпространства

$$\begin{aligned} \exists \lambda^{-2} \in (0; +\infty): 0 \leq \langle M_{\theta} \bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle &= \langle M_{\theta}^{-1} \theta_A \bar{\psi}_1, \theta_A \bar{\psi}_1 \rangle \leq \langle A^{-2} \theta_A \bar{\psi}_1, \theta_A \bar{\psi}_1 \rangle = \\ &= \langle (\theta + A^{-1} \theta A) \bar{\psi}_1, (\theta + A^{-1} \theta A) \bar{\psi}_1 \rangle \leq 2 \langle \theta \bar{\psi}_1, \theta \bar{\psi}_1 \rangle + 2 \langle A^{-1} \theta A \bar{\psi}_1, A^{-1} \theta A \bar{\psi}_1 \rangle \leq \\ &\leq 2 \langle \theta \bar{\psi}_1, \theta \bar{\psi}_1 \rangle + 2 \lambda^{-2} \langle \theta A \bar{\psi}_1, \theta A \bar{\psi}_1 \rangle \leq 2 \langle \theta \bar{\psi}_1, \theta \bar{\psi}_1 \rangle + 2 \lambda^{-2} \langle \theta \bar{\varphi}_1, \theta \bar{\varphi}_1 \rangle \rightarrow 0, \text{ при } h_1, h_2 \rightarrow 0, \end{aligned}$$

где  $\bar{\varphi}_1 = A \bar{\psi}_1$ , т.е.  $\langle M_{\theta} \bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle \rightarrow 0$ ,  $\bar{\psi}_2 \rightarrow \bar{0}$ , при  $h_1, h_2 \rightarrow 0$ , т.к.

$$\theta \bar{\psi}_1 = \left( \nabla_x' \nabla_y - \nabla_y' \nabla_x \right) \bar{\psi}_1 \rightarrow \bar{0}, \theta \bar{\varphi}_1 = \left( \nabla_x' \nabla_y - \nabla_y' \nabla_x \right) \bar{\varphi}_1 \rightarrow \bar{0}, \text{ при } h_1, h_2 \rightarrow 0,$$

по формуле Тейлора, если  $\bar{\varphi}_1, \bar{\psi}_1$  – дискретные аналоги достаточно гладких функций.

Утверждение 5. Имеют место неравенства

$$c_1 \langle \hat{C} \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle \leq \langle \hat{D} \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle \leq \gamma c_2 \langle \hat{C} \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle, \quad \forall \bar{\psi} \in \bar{V}_1.$$

Доказательство. Заметим, что

$$c_1 \langle \hat{C} \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle = c_1 (\langle M_{\theta} \bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle - \langle M_{\theta} \bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle) \leq c_1 \langle M_{\theta} \bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle \leq \langle \Lambda \bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle = \langle \hat{D} \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle.$$

С другой стороны,

$$\gamma c_2 \langle \hat{C} \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle = \gamma c_2 (\langle M_{\theta} \bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle - \langle M_{\theta} \bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle) \geq \gamma c_2 (1 - \alpha_2) \langle M_{\theta} \bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle \geq \langle \Lambda \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle = \langle \hat{D} \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle.$$

Утверждение 6. Если в итерационном процессе из (6)

$$\tau_k = \tau = 2/(c_1 + \gamma c_2) \text{ и } q = (\gamma c_2 - c_1)/(\gamma c_2 + c_1),$$

то

$$\langle \hat{C} \bar{\psi}^k, \bar{\psi}^k \rangle \leq q^2 \langle \hat{C} \bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle, \quad k \in \mathbb{N}.$$

Доказательство. Из итерационного процесса получается, что

$$\hat{C}(\bar{\psi}^k - \bar{\psi}^{k-1}) = -\tau \hat{D} \bar{\psi}^{k-1}, \quad \bar{\psi}^k = T \bar{\psi}^{k-1}, \quad T = E - \tau \hat{C}^{-1} \hat{D}, \quad T = T' > 0,$$

тогда

$$\begin{aligned} \langle \hat{C} \bar{\psi}^k, \bar{\psi}^k \rangle &= \langle \hat{C} T \bar{\psi}^{k-1}, T \bar{\psi}^{k-1} \rangle \leq \sup_{\bar{\psi} \in \bar{V}_1} \frac{\langle \hat{C} T \bar{\psi}, T \bar{\psi} \rangle}{\langle \hat{C} \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle} \langle \hat{C} \bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle = \\ &= \sup_{\bar{\psi} \in \bar{V}_1} \left( \frac{\langle \hat{C} T \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle}{\langle \hat{C} \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle} \right)^2 \langle \hat{C} \bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle = \sup_{\bar{\psi} \in \bar{V}_1} \left( \frac{\langle (\hat{C} - \tau \hat{D} T) \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle}{\langle \hat{C} \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle} \right)^2 \langle \hat{C} \bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle = \\ &= \sup_{\bar{\psi} \in \bar{V}_1} \left( 1 - \tau \frac{\langle \hat{D} \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle}{\langle \hat{C} \bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle} \right)^2 \langle \hat{C} \bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle = \max \{ (1 - \tau c_1)^2, (1 - \tau \gamma c_2)^2 \} \langle \hat{C} \bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle = q^2 \langle \hat{C} \bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle. \end{aligned}$$

Введём норму

$$\| \bar{v}_1 \|_{\Lambda} = \sqrt{\langle \Lambda \bar{v}_1, \bar{v}_1 \rangle}.$$

Теорема 1. В итерационном процессе из (6), при  $\tau_k = \tau = 2/(c_1 + \gamma c_2)$ ,  $k \in \mathbb{N}$ , будет

$$\| \bar{u}_1^k - \bar{u}_1 \|_{\Lambda} \leq \varepsilon \| \bar{u}_1^0 - \bar{u}_1 \|_{\Lambda},$$

где

$$0 \leq \varepsilon \leq \sqrt{\gamma c_2 / c_1} q^k.$$

Доказательство. Из утверждения 5 получается

$$\begin{aligned} \| \bar{\psi}^k \|_{\Lambda}^2 &= \langle \Lambda \bar{\psi}^k, \bar{\psi}^k \rangle \leq \gamma c_2 \langle \hat{C} \bar{\psi}^k, \bar{\psi}^k \rangle \leq \gamma c_2 q^{2k} \langle \hat{C} \bar{\psi}^0, \bar{\psi}^0 \rangle \leq \\ &\leq (\gamma c_2 / c_1) q^{2k} \langle \Lambda \bar{\psi}^0, \bar{\psi}^0 \rangle = (\gamma c_2 / c_1) q^{2k} \| \bar{\psi}^0 \|_{\Lambda}^2. \end{aligned}$$

Вывод. Учитывая вид матриц  $L, L^*$ , можно отметить, что для решения задачи из (4) с  $N$  неизвестными, на основании приведенной теоремы 1, предложенным итерационным процессом из

(б) с относительной погрешностью  $\varepsilon$ , требуется не более чем  $O(N \ln \varepsilon^{-1})$  арифметических операций. Для выбора итерационных параметров  $\tau_k$  не требуется точного знания констант  $\gamma$ ,  $c_1$  и  $c_2$ , т.к. для ускорения сходимости итерационного процесса из (б) можно использовать известные вариационные методы и рекомендовать, например, метод скорейшего спуска.

### Литература

1. Ландау, Л.Д. Теория упругости / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука, 1965. – 204 с.
2. Оганесян, Л.А. Вариационно-разностные методы решения эллиптических уравнений / Л.А. Оганесян, Л.А. Руховец. – Ереван: Изд-во АН АрмССР, 1979. – 235 с.
3. Ушаков, А.Л. Модификация итерационной факторизации для численного решения двух эллиптических уравнений второго порядка в прямоугольной области / А.Л. Ушаков // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Том. 5, № 2. – С. 88–93.
4. Ушаков, А.Л. О приближённом решении одной эллиптической краевой задачи четвёртого порядка / А.Л. Ушаков. – Челябинск: Челябинский государственный технический университет, 1997. – 30 с. (Деп в ВИНТИ 21.04.97, № 1346 – В97).

*Поступила в редакцию 21 февраля 2014 г.*

---

*Bulletin of the South Ural State University  
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"  
2014, vol. 6, no. 2, pp. 17–22*

---

## ITERATIVE FACTORIZATION ON FICTITIOUS CONTINUATION FOR THE NUMERICAL SOLUTION OF ELLIPTIC EQUATION OF THE FOURTH ORDER

**A.L. Ushakov<sup>1</sup>**

The elliptic differential equation of the fourth order is considered under the mixed boundary conditions. The numerical solution is reduced to the solution of the system of linear algebraic equations with triangular matrices, in which quantity of nonzero elements in every line is less than three, by means of iterative factorization on fictitious continuation.

*Keywords: iterative factorization, fictitious continuation.*

### References

1. Landau L.D., Lifshits E.M. *Teoriya uprugosti* (Theory of Elasticity). Moscow, Nauka Publ., 1965. 204 p. (in Russ.).
2. Oganesyanyan L.A., Rukhovets L.A. *Variatsionno-raznostnye metody resheniya ellipticheskikh uravneniy* (Variational-difference methods for solving elliptic equations). Erevan: AN ArmSSR Publ., 1979. 235 p. (in Russ.).
3. Ushakov A.L. Modifikatsiya iteratsionnoy faktorizatsii dlya chislennogo resheniya dvukh ellipticheskikh uravneniy vtoogo poryadka v pryamougol'noy oblasti (Updating iterative factorization for the numerical solution of two elliptic equations of the second order in rectangular area). *Vestnik YuUrGU. Seriya "Matematika. Mekhanika. Fizika"*. 2013. Vol. 5, no. 2. pp. 88–93. (in Russ.).
4. Ushakov A.L. *O priblizhyennom reshenii odnoy ellipticheskoy kraevoy zadachi chetyvertogo poryadka* (An approximate solution of elliptic boundary value problem of fourth order). Chelyabinsk: Chelyabinskii gosudarstvennyi tekhnicheskii universitet Publ., 1997. 30 p. (in Russ.).

*Received 21 February 2014*

---

<sup>1</sup> Ushakov Andrei Leonidovich is Senior Lecturer, Differential and Stochastic Equations Department, South Ural State University.  
E-mail: ushakov\_al@inbox.ru

## ОЦЕНКА ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ТЕЛЕЖКИ ТРАМВАЙНОГО ВАГОНА ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ВИБРОИЗОЛЯЦИИ<sup>1</sup>

**В.А. Романов<sup>2</sup>, П.А. Тараненко<sup>3</sup>, В.Н. Шахринов<sup>4</sup>**

**Методом конечных элементов выполнена оценка влияния жесткости элементов каркаса тележки трамвайного вагона на ее собственные частоты и формы. Продемонстрирована возможность оценки частотного диапазона, в котором элементы каркаса тележки можно считать абсолютно жесткими.**

*Ключевые слова: тележка трамвайного вагона, собственные частоты и формы, виброизоляция, абсолютно жесткое тело.*

### Введение

Вопросы динамического поведения сложной механической системы современного трамвая не могут рассматриваться в отрыве от конструктивных особенностей реализации проекта, которая предполагает удовлетворение большого числа системных требований (по массе, габаритам, пассажироместимости, материалоемкости, энергоэффективности и т.д.). Взаимозависимость решения задачи обеспечения качества механической системы с точки зрения ее динамики от решения сопутствующих (и в целом ряде случаев решаемых с более высокими приоритетами очередности) задач означает необходимость компромиссных подходов, что, в свою очередь, как минимум затрудняет решение, а может сделать его даже не полным.

Конструктивная реализация податливых и демпфирующих элементов взаимодействия колесной пары с рамой, рамы с балкой, использованная в существующей конструкции Усть-Катавского вагоностроительного завода, может быть классифицирована как двухкаскадная виброизоляция. Количественная оценка эффективности существующего прототипа может дать представление о том внимании, которое уделялось разработчиками как вопросам удобства и комфорта пассажиров, так и вопросам усталостной долговечности элементов силового каркаса, и наметить пути совершенствования в новых изделиях.

В расчетных подходах к оценке эффективности виброизоляции по отношению к экспериментальным есть свои очевидные достоинства и недостатки. Определяющим преимуществом расчетных подходов является возможность прогнозирования поведения системы при корректировке объекта исследования (вплоть до утраты ассоциативной связи с прототипом, до неузнаваемости), а основная трудность заключается в сложности создания адекватной модели динамической системы [5].

На сегодняшний день в рамках этапа создания расчетной динамической модели сложной механической системы исследователи получили в свое распоряжение чрезвычайно эффективное средство анализа напряженно-деформированного состояния механических систем – программные продукты на основе конечно-элементных подходов численного интегрирования систем дифференциальных уравнений. Этот инструмент предоставляет возможность с высокой точностью оценивать как статические податливости (жесткости) элементов сложных механических систем, так и их динамические характеристики – собственные частоты и формы (применительно к оценке диссипативных свойств возможности расчетных подходов существенно скромнее). Вместе с тем,

<sup>1</sup> Работа выполнялась при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках проекта «Создание высокотехнологичного производства модельного ряда энергосберегающих низкопольных трамвайных вагонов модульной конструкции» по договору №02.G36.31.0002 от 12.02.2013 г.

<sup>2</sup> Романов Вячеслав Александрович – кандидат технических наук, доцент, кафедра Прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: r.v@mail.ru

<sup>3</sup> Тараненко Павел Александрович – кандидат технических наук, доцент, кафедра Прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: pataranenko@gmail.com

<sup>4</sup> Шахринов Владимир Николаевич – аспирант, кафедра Прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет.

в силу алгоритмических особенностей решения динамических задач (как в нестационарной, так и в стационарной постановках) полные конечно-элементные модели, приемлемые для статического анализа и анализа собственных частот и форм, оказываются неприемлемыми для формулировок динамических задач. Происходит это, в первую очередь, по причине ограниченности вычислительных ресурсов. Особую актуальность это обстоятельство приобретает при решении параметрических задач. Из сказанного следует, что при решении динамических задач механических систем с достаточно сложной геометрией построение расчетной модели объекта исследования может потребовать дополнительного шага – перехода от конечно-элементной модели исходной геометрии к модели, ориентированной на использование в динамических задачах, и отличающейся от исходной существенно более скромными требованиями к вычислительным ресурсам.

В настоящей работе излагаются результаты первых шагов в направлении построения расчетной модели трамвая, ориентированной на решение динамических задач.

Так, при разработке нового трамвайного вагона требуется удовлетворить установленным нормативным значениям по плавности хода при максимальной скорости и номинальной нагрузке [1–3] и по плавности хода для порожних и груженых вагонов через 5–10 км/ч вплоть до скорости, на 10–15 км/ч, превышающей конструкционную [4, 5]. Максимальный уровень шума в кабине водителя, в пассажирском помещении, а также наружного шума, измеренного на расстоянии 7,5 м от колеи при движении одиночного вагона со скоростью 40 км/ч не должен превышать допустимых значений [2]. Динамические показатели тележек порожних (груженых) вагонов не должны превышать допустимых значений, приведенных в [5]. Допускаемые уровни виброускорений, измеренных в вертикальном и горизонтальном (продольном и поперечном) направлениях на сидениях вблизи пятников, в центре трамвайного вагона и в кабине водителя – значений, установленных в [6].

### Конечноэлементная модель тележки трамвайного вагона

Трехмерные геометрические модели, которые создают инженеры-конструкторы при проектировании новых изделий, весьма точно отражают компоновку элементов, но практически непригодны для построения конечноэлементных моделей с целью последующей оценки прочности, и поэтому нуждаются в серьезной корректировке. В частности, при прочностных расчетах кузова и тележки трамвайного вагона использование моделей, состоящих из плоских элементов типа Shell, позволяет без потери точности на порядок уменьшить ресурсоемкость задачи по сравнению с трехмерными конечноэлементными моделями. Поэтому первым шагом на пути построения конечноэлементной модели из элементов типа Shell является упрощение объемной модели. Такое упрощение реализуют путем преобразования объемов в поверхности. Однако в достаточно сложных с геометрической точки зрения деталях и элементах конструкций при перестроении модели из объемной в поверхностную приходится преодолевать трудности, связанные со стыковкой вновь созданных поверхностей. Так в сборках, состоящих из объемов, зачастую детали и элементы конструкции находятся на некотором расстоянии друг от друга, поэтому при создании модели, состоящей из поверхностей, между соседними поверхностями появляются зазоры (рис. 1). Для построения работоспособной конечноэлементной модели такие зазоры следует устранять.

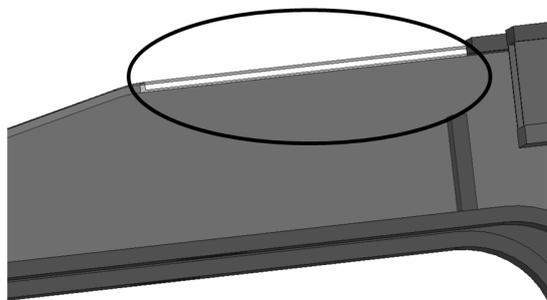


Рис. 1. Зазор между поверхностями после перестроения объемной модели в поверхностную

Эффективно решать эти проблемы позволяет, например, пакет SpaceClaim, в котором просто и удобно реализованы алгоритмы создания и соединения срединных поверхностей. В частности, для создания поверхностной модели достаточно использовать всего две команды этого программного пакета – Mid-surface и Extend.

В рассматриваемой модели тележки буксовое подрессоривание заменено пружинами в вертикальном и горизонтальном направлениях (рис. 2), вагон представлен сосредоточенной массой, оси колесных пар приняты абсолютно жесткими, масса тележки учитывает массы навесного оборудования (двигатели, редукторы), путем увеличения плотности материала. В дальней-

шем эти элементы конструкции будут представлены твердотельными. Расчетная динамическая модель тележки приведена на рис. 3.

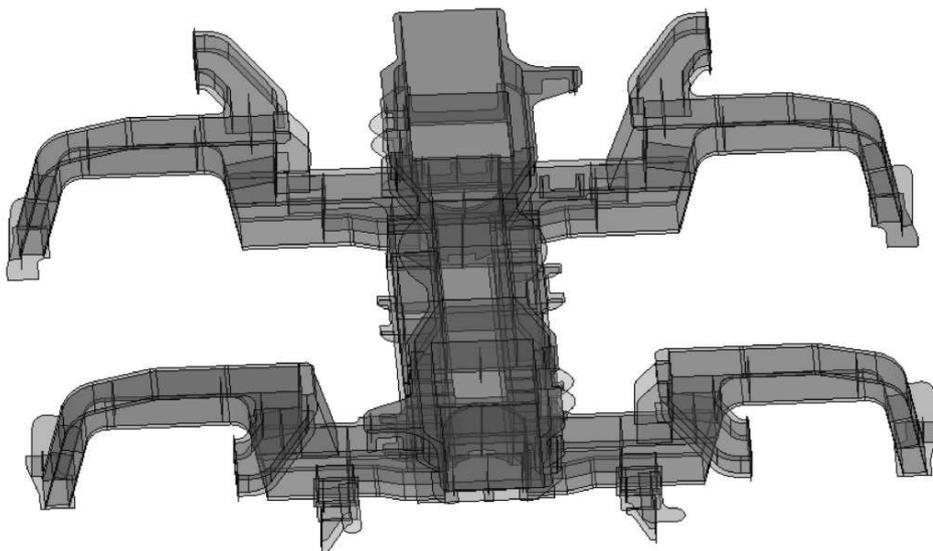


Рис. 2. Геометрическая модель тележки трамвайного вагона, состоящая из срединных поверхностей

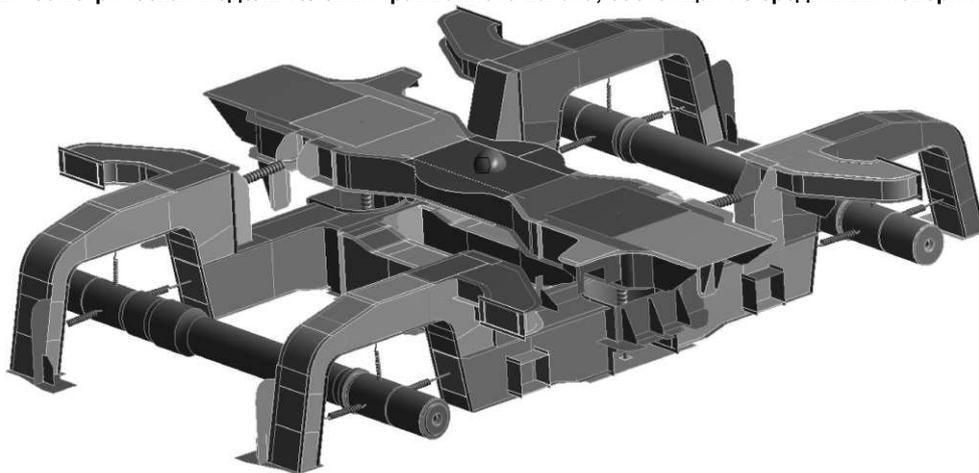


Рис. 3. Расчетная динамическая модель тележки трамвайного вагона

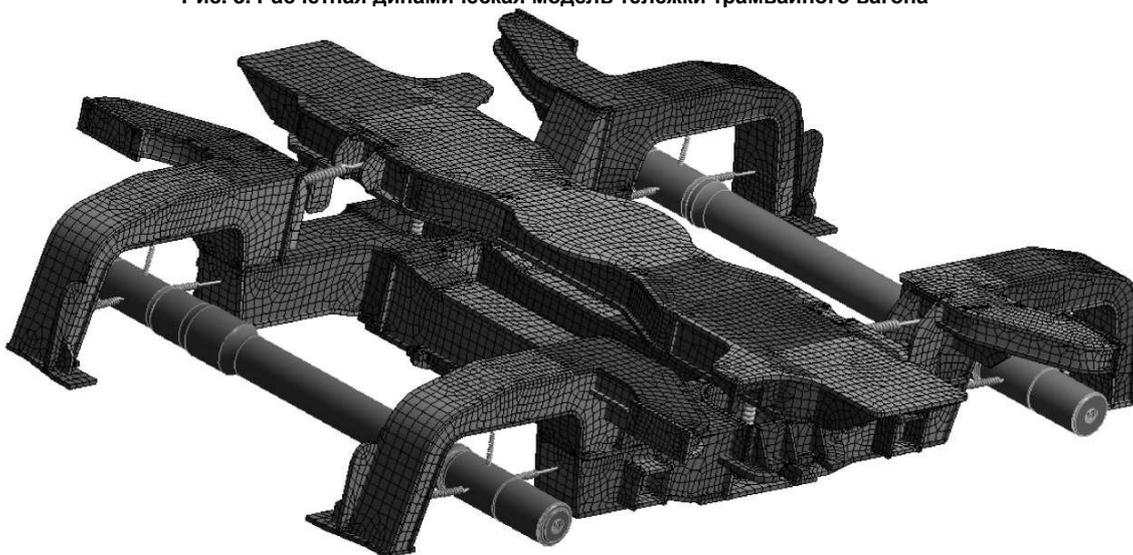


Рис. 4. Конечноэлементная модель тележки

## Механика

### Анализ собственных частот и форм тележки трамвайного вагона

Конечноэлементная модель тележки, с использованием которой найдены ее собственные частоты и формы, приведена на рис. 4.

Рассмотрены два случая:

- 1) элементы каркаса рамы тележки приняты упругими;
- 2) элементы каркаса рамы тележки приняты абсолютно жесткими.

Для первого и второго расчетных случаев найдены собственные частоты и соответствующие им формы колебаний тележки. Сравнительный анализ позволил выявить собственные частоты и формы, совпадающие в первом и втором расчетных случаях. Результаты сопоставления частот приведены в таблице. Собственная форма, соответствующая частоте 4,65 Гц, приведена на рис. 5.

Собственные частоты тележки трамвайного вагона, Гц

№	Элементы тележки – упругие тела	Элементы тележки – абсолютно твердые тела
1	2,40	2,37
2	4,65	4,62
3	5,17	5,16
4	7,10	7,09
5	8,27	8,24
6	8,40	8,35
7	12,36	12,42
8	16,07	16,22
9	20,77	21,11

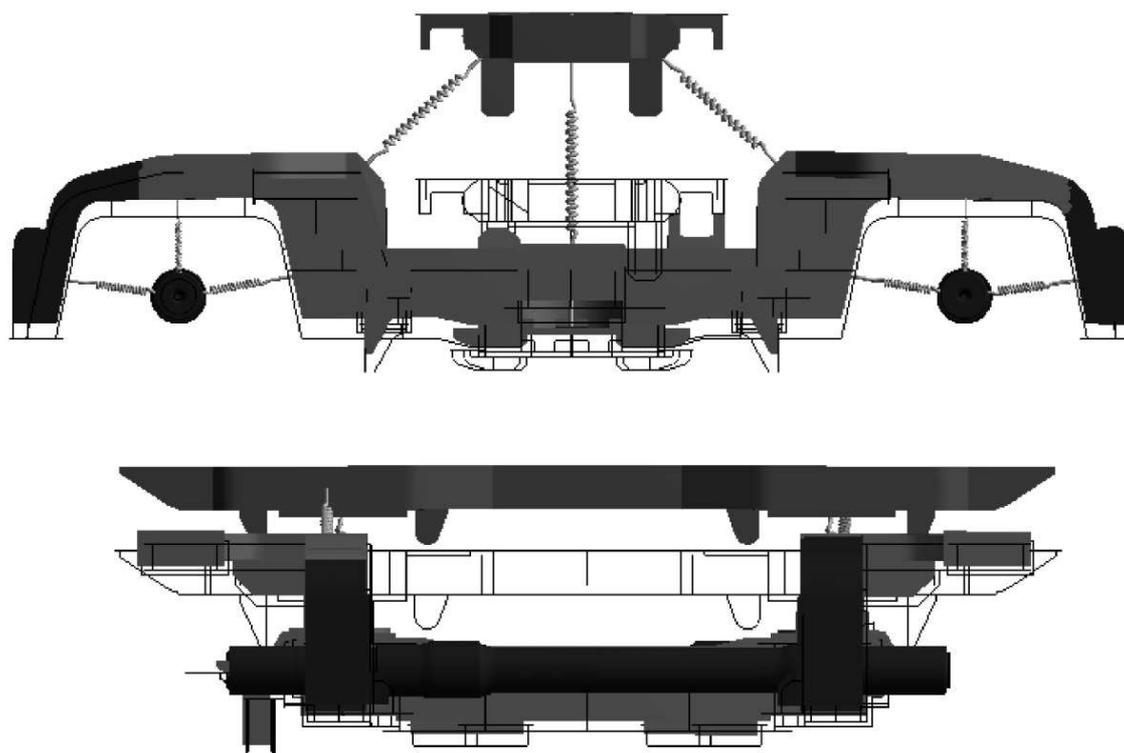


Рис. 5. Собственная форма тележки, соответствующая частоте 4,65 Гц

Таким образом, элементы каркаса трамвайного вагона можно считать абсолютно жесткими в диапазоне частот от 0 до 20 Гц. На более высоких частотах элементы каркаса тележки начинают деформироваться и, в случае построения маломассовой дискретной модели тележки, для снижения ресурсоемкости задачи рекомендуется их замена эквивалентными системами с малым числом степеней свободы. Для построения таких моделей предполагается использовать методы идентификации механических систем [7, 8].

### Эффективность подрессоривания как элемента виброизоляции

Расчет установившихся вынужденных колебаний проведен с учетом демпфирующих элементов (см. рис. 5). Внешнее воздействие, соответствующее кинематическому возбуждению, задано в виде вертикального перемещения оси колесной пары (рис. 6).

Для кузова, представленного в этой модели одной сосредоточенной массой, найдена амплитудно-частотная характеристика (рис. 7). По вертикальной оси отложена амплитуда установившихся колебаний кузова относительно амплитуды входного воздействия.

Приведенные на рис. 7 относительные амплитуды установившихся вынужденных колебаний кузова при их сопоставлении с допустимыми значениями предоставляют возможность оценить эффективность виброизоляции.

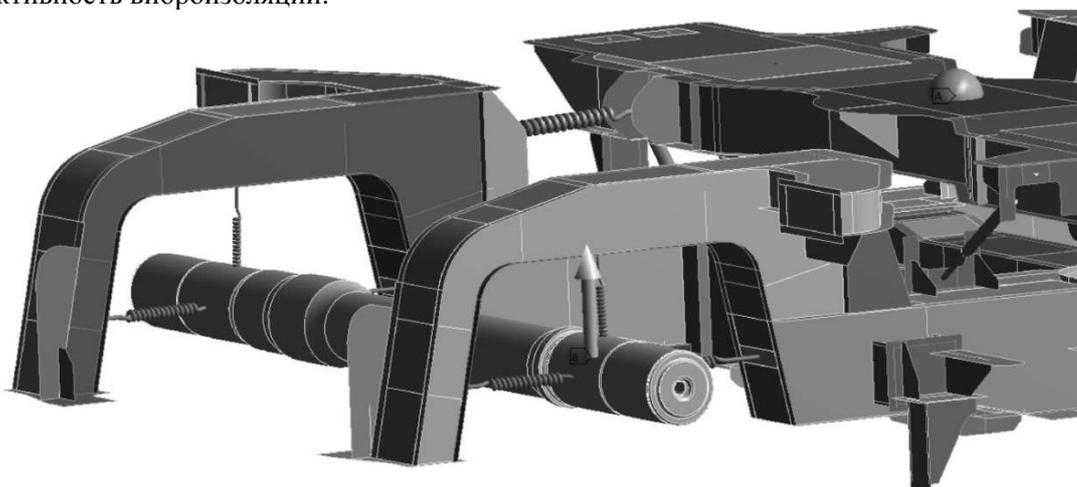


Рис. 6. Модель тележки трамвайного вагона с демферами для расчета установившихся вынужденных колебаний

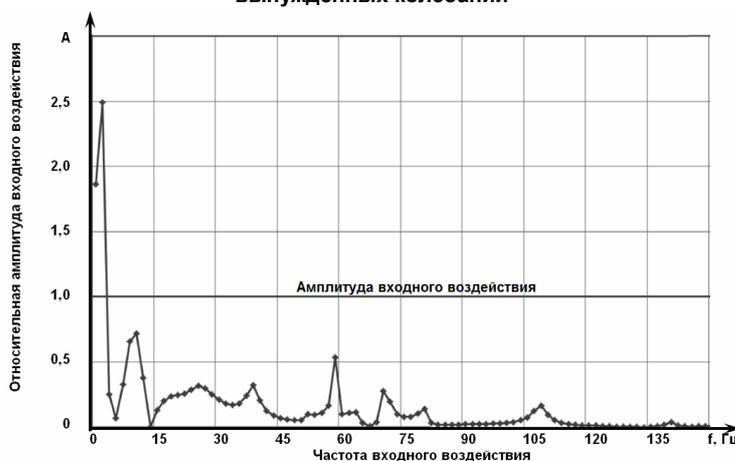


Рис. 7. Относительные амплитуды установившихся вынужденных колебаний кузова при кинематическом возбуждении оси колесной пары

Таким образом, продемонстрирована возможность получения оценки виброизоляции тележки трамвайного вагона. Конечно-элементную модель тележки предполагается использовать для построения дискретной модели тележки с малым числом степеней свободы, учитывающей конечное число собственных частот и форм, вносящих существенный вклад в форму вынужденных колебаний.

### Выводы

1. Построена трехмерная конечноэлементная модель тележки, которая может быть использована в задаче оценки виброизоляции трамвайного вагона.
2. Элементы каркаса тележки трамвайного вагона можно считать абсолютно жесткими в диапазоне собственных частот 0...20 Гц.
3. Все проведенные расчеты носят предварительный характер и являются первым шагом для последующего решения задачи виброизоляции нового трамвайного вагона.

### Литература

1. Нормы для расчета и проектирования механической части новых вагонов трамвая колеи 1524 мм. – М.: ВНИИВ, 1989. – 100 с.
2. ГОСТ 8802-78. Вагоны трамвайные пассажирские. Технические условия.
3. ГОСТ 27364-87. Вагоны трамвайные пассажирские. Общие технические условия.
4. ОСТ 24.050.16-85 Вагоны пассажирские. Методика определения плавности хода.
5. ОСТ 24.050.37-84 Вагоны грузовые и пассажирские. Методы испытаний на прочность и ходовые качества.
6. ОСТ 24.050.28-81 Вагоны пассажирские методика измерения и оценки вибрации.
7. Редько, С.Ф. Идентификация механических систем / С.Ф. Редько, В.Ф. Ушкалов, В.П. Яковлев. – Киев: Наукова думка, 1985. – 216 р.
8. Хейлен, В. Модальный анализ: теория и испытания/ Вард Хейлен, Стефан Ламменс, Пол Сас. – М.: Новатест, 2010. – 319 с.

Поступила в редакцию 12 июля 2013 г.

---

*Bulletin of the South Ural State University  
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"  
2014, vol. 6, no. 2, pp. 23–28*

---

## ESTIMATE OF DYNAMIC PROPERTIES OF TRAM CAR BOGIE FOR THE SOLUTION OF VIBRATION ISOLATION PROBLEM

V.A. Romanov<sup>1</sup>, P.A. Taranenko<sup>2</sup>, V.N. Shahrinov<sup>3</sup>

Using finite element method the estimate of influence rigidity of the framework elements of tram car bogie on its own frequency and shapes is performed. The possibility of evaluation of the frequency range, in which the elements of the frame of a bogie can be considered as absolutely rigid, is shown.

*Keywords: tram car bogie, natural frequencies and shapes, vibration isolation, absolutely rigid body.*

### References

1. *Normy dlya rascheta i proektirovaniya mekhanicheskoy chasti novykh vagonov tramvaya kolei 1524 mm* (Norms for calculation and design of a mechanical part of new tram cars ruts of 1524 mm). Moscow: VNIIV Publ., 1989. 100 p. (in Russ.).
2. *GOST 8802-78. Vagony tramvaynye passazhirskie. Tekhnicheskie usloviya.* (GOST 8802-78. Passenger tram cars. General technical specifications). (in Russ.).
3. *GOST 27364-87. Vagony tramvaynye passazhirskie. Obshchie tekhnicheskie usloviya.* (GOST 27364-87. Tramway passenger cars. General specifications). (in Russ.).
4. *OST 24.050.16-85 Vagony passazhirskie. Metodika opredeleniya plavnosti khoda.* (OST 24.050.16-85 Passenger cars. Methods for ride comfort determination). (in Russ.).
5. *OST 24.050.37-84 Vagony gruzovye i passazhirskie. Metody ispytaniy na prochnost' i khodovye kachestva* (OST 24.050.37-84 Freight and passenger cars. Methods of durability tests and performance characteristics). (in Russ.).
6. *OST 24.050.28-81 Vagony passazhirskie metodika izmereniya i otsenki vibratsii* (OST 24.050.28-81 Passenger cars. Methods for vibration measuring and estimation). (in Russ.).
7. Red'ko S.F., Ushkalov V.F., Yakovlev V.P. *Identifikatsiya mekhanicheskikh sistem* (Identification of mechanical systems.). Kiev: Naukova dumka Publ., 1985. 216 p. (in Russ.).
8. Kheylen V., Lammens S., Sas P. *Modal'nyy analiz: teoriya i ispytaniya* (Modal Analysis Theory and Testing). Moscow: Novatest Publ., 2010. 319 p. (in Russ.). [Heylen W., Lammens S., Sas P. *Modal Analysis Theory and Testing*. KUL Press, Leuven, Belgium, 1997. (in Eng.).]

*Received 12 July 2013*

---

<sup>1</sup> Romanov Vyacheslav Alexandrovich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, Applies Mechanics, Dynamic and Strength of Machines Department, South Ural State University.

E-mail: r.v@mail.ru

<sup>2</sup> Taranenko Pavel Alexandrovich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, Applies mechanics, Dynamic and Strength of Machines Department, South Ural State University. E-mail: pataranenko@gmail.com

<sup>3</sup> Shahrinov Vladimир Nikolaevich is Post-graduate student, Applies Mechanics, Dynamic and Strength of Machines Department, South Ural State University.

# РАСЧЕТНО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ СОБСТВЕННЫХ ЧАСТОТ И ФОРМ ЭЛЕМЕНТА КАРКАСА ТРАМВАЙНОГО ВАГОНА<sup>1</sup>

*П.А. Тараненко<sup>2</sup>, В.Н. Шахринов<sup>3</sup>, О.А. Кудрявцев<sup>4</sup>, Д.А. Колкотин<sup>5</sup>, С.А. Хрулев<sup>6</sup>, А.В. Ерпалов<sup>7</sup>*

**Предложена методика оценки жесткости элемента каркаса кузова трамвайного вагона путем экспериментального определения спектра его собственных частот. Оценена применимость этой методики к определению изменения жесткости элемента каркаса при появлении некачественного сварного шва.**

*Ключевые слова: контроль жесткости, сварное соединение, металлический каркас, крыша трамвайного вагона, спектр собственных частот, экспериментальный модальный анализ.*

## **Введение**

Основными факторами, влияющими на жесткость металлических сварных каркасов при одинаковых геометрических размерах, являются свойства материала и качество сварных швов. Так, в каркасе трамвайного вагона присутствует несколько тысяч сварных швов сложной конфигурации и значительной протяженности, что приводит к обилию связей «жесткость системы – состояние сварных швов», которое не позволяет однозначно определить причину ее изменения на основе анализа поведения конструкции в целом.

Одним из вариантов оценки жесткости конструкции (и ее изменения в зависимости от качества сварных швов) является динамический метод, основанный на возбуждении конструкции, регистрации отклика и последующем сравнительном анализе спектра собственных частот.

Цель выполненной работы заключалась в экспериментальной отработке предлагаемого метода на реальной конструкции. В частности, необходимо было экспериментальным путем оценить спектр собственных частот элемента каркаса трамвайного вагона, обладающего одним некачественным сварным швом, и сопоставить его со спектром частот той же самой конструкции, но обладающей качественными сварными швами.

## **Расчетный анализ собственных частот каркаса крыши кузова трамвайного вагона**

В качестве объекта исследования выступает каркас крыши трамвайного вагона производства Усть-Катавского вагоностроительного завода, геометрическая модель которого приведена на рис. 1. С целью подготовки к эксперименту на конечноэлементной модели каркаса получена расчетная оценка его собственных частот и форм.

Основой для конечноэлементных расчетов послужила объемная модель крыши, преобразованная в модель, состоящую из срединных поверхностей. Такое преобразование позволило использовать при конечноэлементных расчетах элементы типа «shell», снизив на порядок ресурсоемкость задачи. Рассматриваемая конструкция содержит 180 деталей, соединенных посредством сварки. Для моделирования сварных швов использованы контакты между элементами конструкции типа «bonded» (склейка), запрещающие любые взаимные перемещения в месте контакта. Из-

<sup>1</sup> Работа выполнялась при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках проекта «Создание высокотехнологичного производства модельного ряда энергосберегающих низкопольных трамвайных вагонов модульной конструкции» по договору №02.G36.31.0002 от 12.02.2013 г.

<sup>2</sup> Тараненко Павел Александрович – кандидат технических наук, доцент, кафедра Прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет.  
E-mail: pataranenko@gmail.com

<sup>3</sup> Шахринов Владимир Николаевич – аспирант, кафедра Прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет.

<sup>4</sup> Кудрявцев Олег Александрович – аспирант, кафедра Прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет.

<sup>5</sup> Колкотин Дмитрий Анатольевич – студент, кафедра Прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет.

<sup>6</sup> Хрулев Сергей Александрович – студент, кафедра Прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет.

<sup>7</sup> Ерпалов Алексей Викторович – аспирант, кафедра Летательные аппараты и автоматические установки, Южно-Уральский государственный университет.

## Механика

за большого количества соединений сложной конфигурации контактные связи задавались вручную в соответствии с предоставленными сборочными чертежами.

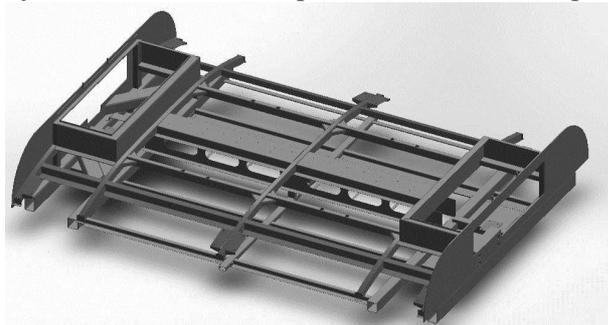


Рис. 1. Геометрическая модель каркаса крыши

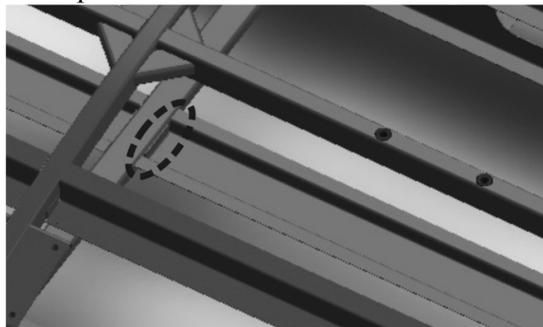


Рис. 2. Некачественный сварной шов

На простейшей модели (одно сварное соединение пластины и профиля) выполнены предварительные тестовые расчеты собственных частот соединения в зависимости от варианта моделирования пунктирного сварного шва (простая склейка по линии контакта; склейка по пунктирной линии, повторяющей прерывистый шов; создание промежуточной поверхности меньшей толщины). Установлено, что конфигурация контакта оказывает влияние только на собственные частоты колебаний выше 150 Гц.

Собственные частоты и формы определены при свободных граничных условиях для двух расчетных случаев: конструкция с качественными сварными швами и конструкция с одним некачественным сварным швом (рис. 2). Некачественный сварной шов смоделирован удалением связи между элементами каркаса – в месте, отмеченном пунктиром на рис. 2. Первые шесть нулевых частот, соответствующих перемещениям и поворотам каркаса как абсолютно твердого тела, не приводятся. Первые 10 ненулевых собственных частот приведены в таблице.

Наличие дефекта приводит как к сдвигу некоторых собственных частот (6 и 10 собственные частоты изменяются более чем на 5 %), так и к появлению новых форм колебаний конструкции (колебания отсоединенных элементов). Частоты с номерами 1\* и 2\* (выделены курсивом) соответствуют изгибным и крутильным формам колебаний консольного корытного профиля, отсоединенного от профиля коробчатого сечения.

Максимальный сдвиг собственных частот для конструкции с некачественным сварным швом не превышает 7 %. Такой незначительный сдвиг собственных частот обусловлен следующим фактором. Каркас крыши состоит из двух частей – верхней и нижней. Некачественный сварной шов расположен на нижней части каркаса. Верхняя часть каркаса обладает существенно большей жесткостью, чем нижняя, поэтому изменение жесткости в более податливой части крыши слабо влияет на изменение жесткости (снижение собственных частот) всей конструкции.

При рассмотрении только нижней части крыши с тем же самым дефектом максимальное снижение собственных частот составило уже 23 %.

Собственные частоты каркаса крыши трамвайного вагона

№	Собственные частоты конструкции с качественными сварными швами (эталон), Гц	Собственные частоты конструкции с некачественным сварным швом, Гц	$\delta$ , %
<b>1*</b>	–	<b>12,42</b>	–
1	15,74	16,13	2,5
<b>2*</b>	–	<b>20,14</b>	–
2	22,88	22,53	1,5
3	23,09	23,01	0,3
4	30,96	31	0,1
5	36,93	35,38	4,2
6	41,85	39,37	5,9
7	42,14	42,31	0,4
8	43,26	43,02	0,6
9	46,87	46,82	0,1
10	56,48	52,63	6,8

### Экспериментальный модальный анализ каркаса крыши кузова трамвайного вагона

Предварительный конечноэлементный расчет позволил оценить низшую частоту собственных колебаний каркаса крыши (15,74 Гц) и показал, что исследуемая конструкция обладает достаточно густым спектром собственных частот (в диапазоне до 60 Гц каркас имеет 10 собственных частот).

В ходе испытаний, проведенных на базе Усть-Катавского вагоностроительного завода, предстояло решить следующие задачи:

- а) зарегистрировать спектр собственных частот каркаса крыши с качественными сварными швами;
- б) зарегистрировать спектр собственных частот каркаса крыши с одним некачественным сварным швом;
- в) для обоснования применения средства возбуждения колебаний использовать модальный вибростенд, изображенный на рис. 3, и ударный молоток, изображенный на рис. 4;
- г) для оценки стабильности результатов последовательно возбуждать колебания в нескольких точках конструкции в трех ортогональных направлениях.



Рис. 3. Возбуждение колебаний каркаса крыши с использованием ударного молотка

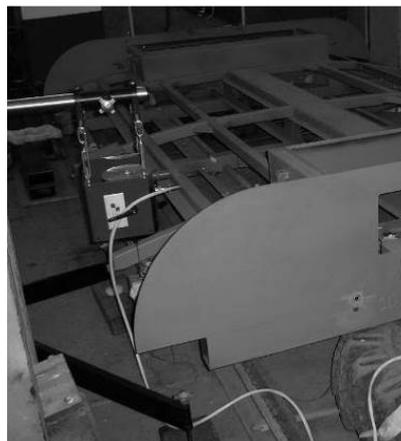


Рис. 4. Возбуждение колебаний каркаса крыши с использованием модального вибростенда

Для обеспечения низких собственных частот колебаний как твердого тела каркас крыши установлен на податливые опоры [1]. Для возбуждения колебаний использованы два средства: переносной вибростенд и ударный молоток.

Недостатки использования модального вибростенда в качестве возбудителя колебаний:

- сложность монтажа (вывешивание, необходимость использования специальных стоек, необходимость качественной приклейки датчика силы на конструкции, трудность монтажа стингера строго перпендикулярно поверхности конструкции);
- сложность (а иногда и невозможность) подведения вибростенда в требуемую точку конструкции;
- обеспечение предотвращения потери устойчивости стингера;
- сравнительно большой вес оборудования и оснастки (вибростенд – 20 кг, усилитель 15 кг, стойка для вывешивания 55 кг).

Достоинства использования модального вибростенда в качестве возбудителя колебаний:

- возможность возбуждения колебаний в больших конструкциях (весом порядка нескольких тонн) при сравнительно небольшом весе (20 кг) и толкающем усилии (44 кг);
- возможность обеспечения детерминированных режимов нагружения;
- возможность обеспечения постоянства направления нагружения;
- широкий диапазон частот возбуждения.

Недостатки использования ударного молотка:

- непостоянство направления воздействия при ударах;
- непостоянство амплитуды ударного импульса при нанесении удара;
- возможность нанесения некорректных (например, двойных) ударов;
- ограниченный диапазон частот возбуждения.

Достоинства использования молотка в качестве возбудителя колебаний:

- возможность возбуждения колебаний в больших конструкциях (весом несколько тонн) при сравнительно небольшом весе (порядка пяти килограмм);
- удобство и простота использования;
- возможность возбуждения колебаний практически в любой доступной точке конструкции;
- не требуется наклейка датчика силы на конструкцию.

## Механика

Молоток является более простым в монтаже и использовании. Его использование позволяет существенно ускорить проведение испытаний.

Для сбора виброускорений с датчиков использована система сбора данных LMS International (Бельгия). Для возбуждения колебаний, регистрации отклика и идентификации собственных частот и форм использованы модули пакета LMS Test.Lab 12A Spectral Testing, Impact Testing и Polymax.

Количество точек измерения виброускорений на каркасе крыши с качественными сварными швами – 25 шт, на каркасе крыши с одним некачественным сварными швом – 26 шт. В каждой точке измерены виброускорения в трех направлениях.

Каркас крыши с некачественным сварным швом изображен на рис. 5.

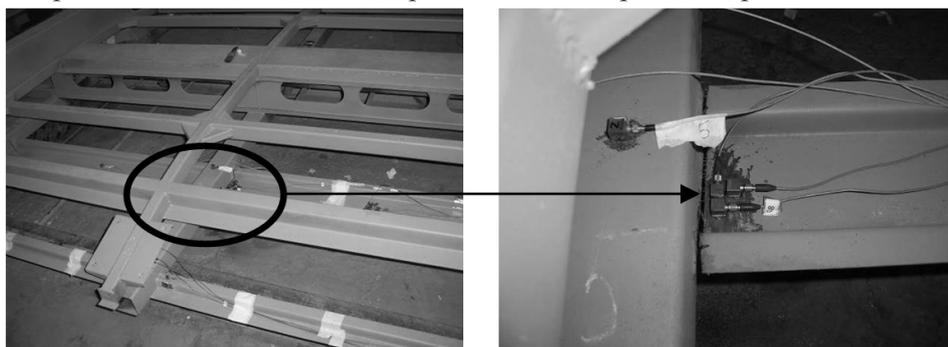


Рис. 5. Каркас крыши с одним некачественным сварным швом

При испытаниях с использованием ударного молотка в выбранную точку конструкции наносили удар (см. рис. 3), записывали ударный импульс, на выходе регистрировали отклик по виброускорениям со всех акселерометров во временной области, путем быстрого преобразования Фурье входной и выходной сигналы переводили из временной области в частотную, рассчитывали их отношение – частотные передаточные функции [1, 2]. После этого удар повторяли. Путем предварительных тестов установлено время сбора данных 16 секунд, разрешающая способность спектра – 0,0625 Гц. Каждый эксперимент – это результат 10 осреднений по ударному возбуждению в одну точку в одном направлении.

При проведении испытаний с использованием модального вибровозбудителя (см рис. 4) на вход подавали случайное возбуждение (белый шум) в диапазоне от 0 до 256 Гц, на выходе регистрировали отклик по виброускорениям со всех акселерометров, рассчитывали частотные передаточные функции. После этого цикл нагружения повторяли. Путем предварительных тестов установлено время сбора данных 16 с, разрешающая способность спектра – 0,0625 Гц. Каждый эксперимент – результат 20 осреднений по циклам случайного возбуждения.

Первая собственная форма для конструкции с качественными сварными швами приведена на рис. 6, а для конструкции с некачественными сварными швами – на рис. 7.

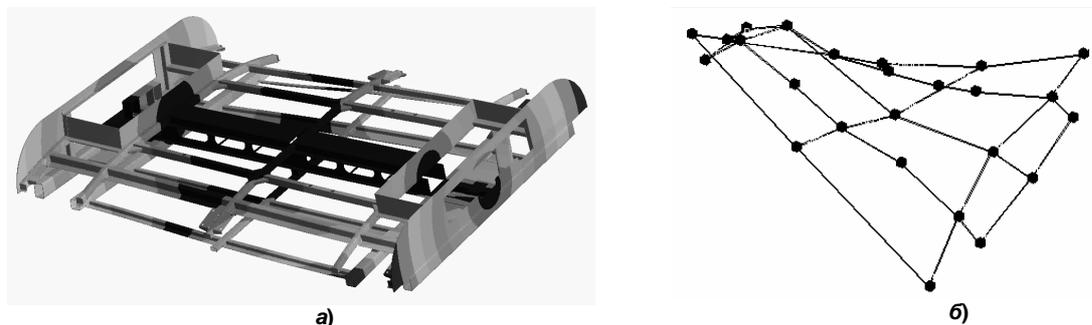


Рис. 6. Первая собственная форма колебаний (крутильная) конструкции с качественными сварными швами: а)  $f = 15,74$  Гц (расчет); б)  $f = 12,4$  Гц (эксперимент)

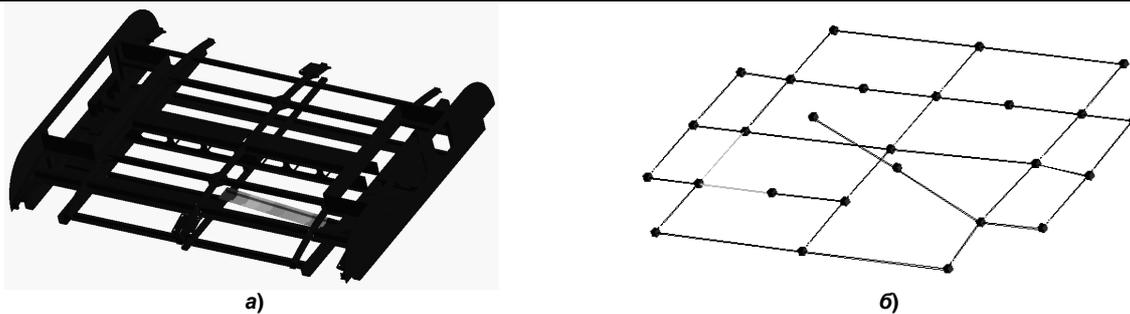


Рис. 7. Первая собственная форма колебаний конструкции с некачественным сварным швом:  
а)  $f = 12,42$  Гц (расчет); б)  $f = 12,05$  Гц (эксперимент)

Спектры собственных частот конструкции с качественными и одним некачественным сварным швом приведены на рис. 8.

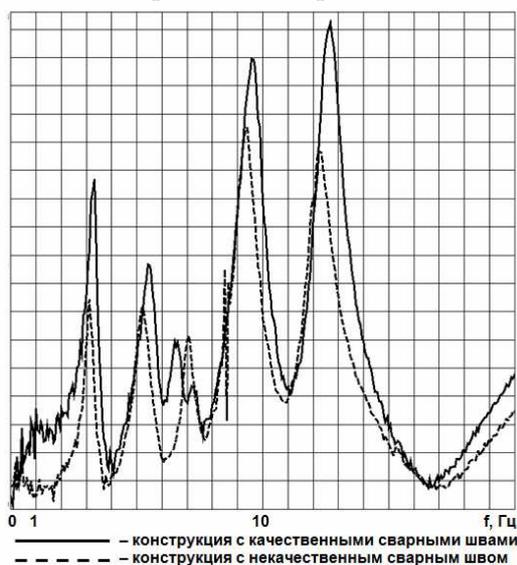


Рис. 8. Экспериментальные спектры собственных частот

как абсолютно твердого тела;

3. Для возбуждения колебаний использованы 3 различных точки и три направления. В спектрах частот, полученных по результатам возбуждения в трех различных точках и трех направлениях, наблюдалась повторяемость результатов.

4. Спектр частот, полученный с использованием ударного молотка, практически не отличается от спектра, полученного с использованием модального вибростенда. Использование молотка массой 235 грамм и чувствительностью 2,25 мВ/Н и датчиков РСВ чувствительностью 100 мВ/г оказалось достаточно для надежного возбуждения колебаний в каркасе крыши весом в 400 кг.

5. Максимальное снижение собственных частот каркаса крыши с некачественным сварным швом (см. рис. 5) составляет всего лишь 6 % (см. таблицу). Максимальное снижение собственных частот при расчете только нижней части крыши, но с тем же самым дефектом составляет уже 23 %.

## Выводы

1. Качество процедуры контроля жесткости существенно зависит от относительной доли дефектов сварных швов в конструкции. Поэтому применять динамический метод контроля жесткости для диагностики дефектов в сварных швах следует на как можно более ранних этапах сборки каркаса модуля, например, на этапах сборки каркаса боковины, нижней части крыши.

2. Наличие дефектов в сварных швах может приводить к появлению «дополнительных» частот в спектре, отсутствующих в спектре конструкции с качественными сварными швами. Диагностировать такие частоты можно только в том случае, если устанавливать датчик в непосредственной близости от места дефекта. Поскольку до проведения диагностики место дефекта в свар-

## Обсуждение результатов

1. Низшая собственная частота каркаса крыши составила 12,4 Гц. Этой частоте соответствует крутильная форма колебаний (см. рис. 6). Поскольку в эксперименте каркас крыши установлен на податливые опоры, жесткость которых неизвестна, трудно ожидать точного совпадения результатов эксперимента с расчетом (рис. 6, а).
2. Низшая собственная частота каркаса крыши с некачественным сварным швом составила 12,05 Гц. Этой частоте соответствует форма колебаний тонкостенного профиля (см. рис. 7). Всплески на спектрах собственных частот ниже 10 Гц, найденных экспериментально (см. рис. 8), обусловлены колебаниями на податливых амортизаторах каркаса крыши

ном шве неизвестно, высока вероятность пропуска «дополнительных частот» путем расшифровки сигнала с датчика, установленного в произвольном месте и оказавшемся далеко от места дефекта. Поэтому процедура контроля жесткости (контроля качества сварных швов) с использованием только одного датчика обладает недостаточной точностью для реализации на практике.

3. В цеховых условиях более простым и удобным для возбуждения колебаний является использование ударного молотка. Наносить удары следует в точки, обладающие наибольшей податливостью. Для повышения достоверности контроля жесткости конструкции (контроля качества сварных швов) следует регистрировать сигналы в нескольких характерных точках конструкции. Однако в этом случае существенно возрастает время испытаний (определение мест наклейки, зачистка поверхности, наклейка датчиков, прокладка кабелей). В цеховых условиях более эффективными могут оказаться бесконтактные методы измерения.

### Литература

1. Хейлен, В. Модальный анализ: теория и испытания / В. Хейлен, С. Ламменс, П. Сас. – М.: Новатест, 2010. – 319 с.

2. Фролов, К.В. Машиностроение. Энциклопедия: в 40 т. Т. 2. Динамика и прочность машин. Теория механизмов и машин / К.В. Фролов. – М.: Машиностроение, 1995. – 624 с.

*Поступила в редакцию 12 июля 2013 г.*

---

*Bulletin of the South Ural State University  
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"  
2014, vol. 6, no. 2, pp. 29–34*

---

## CALCULATED AND EXPERIMENTAL ANALYSIS OF NATURAL FREQUENCIES AND ELEMENTS FRAME FOR TRAM CAR

*P.A. Taranenko<sup>1</sup>, V.N. Shahrinov<sup>2</sup>, O.A. Kudryavtsev<sup>3</sup>, D.A. Kolkotin<sup>4</sup>, S.A. Khrulev<sup>5</sup>, A.V. Erpalov<sup>6</sup>*

Method for evaluation of the stiffness of the frame body for tram car is shown with experimentally determination of the spectrum of its natural frequencies. The application of this method to determine changes in the stiffness of frame is estimated at poor welded seam.

*Keywords: stiffness control, weld connection, metal frame, roof of a tram car, natural frequencies, experimental modal analysis.*

### References

1. Kheylen V., Lammens S., Sas P. *Modal'nyy analiz: teoriya i ispytaniya* (Modal Analysis Theory and Testing). Moscow: Novatest Publ., 2010. 319 p. (in Russ.). [Heylen W., Lammens S., Sas P. *Modal Analysis Theory and Testing*. KUL Press, Leuven, Belgium, 1997. (in Eng.)]

2. Frolov K.V. *Mashinostroenie. Entsiklopediya: v 40 t. T. 2. Dinamika i prochnost' mashin. Teoriya mekhanizmov i mashin* (Mechanical engineering. Encyclopedia in 40 volumes. Vol. 2. Dynamics and strength of machines. Theory of mechanisms and machines). Moscow, Mashinostroenie Publ., 1995. 624 p. (in Russ.).

*Received 12 July 2013*

---

<sup>1</sup> Taranenko Pavel Alexandrovich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, South Ural state university.

E-mail: pataranenko@gmail.com

<sup>2</sup> Shahrinov Vladimir Nikolaevich is Post-graduate Student, Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, South Ural state university.

<sup>3</sup> Kudryavtsev Oleg Aleksandrovich is Post-graduate Student, Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, South Ural state university.

<sup>4</sup> Kolkotin Dmitry Anatolievich is Undergraduate Student, Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, South Ural state university.

<sup>5</sup> Khrulev Sergey Aleksandrovich is Undergraduate Student, Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, South Ural state university.

<sup>6</sup> Erpalov Alexey Viktorovich is Post-graduate Student, Aircraft and automatic systems department, South Ural state university.

# РАСЧЕТ ДЕФОРМИРОВАНИЯ ГЕОМЕТРИЧЕСКИ НЕЛИНЕЙНОЙ ПЛОСКОЙ КОНСТРУКЦИИ ИЗ ИДЕАЛЬНО ПЛАСТИЧНОГО МАТЕРИАЛА

А.О. Щербакова<sup>1</sup>

Предложенная расчетная модель позволяет, зная нагрузки, приложенные к плоской конструкции из идеально пластичного материала, найти соответствующие смещения ее точек и, наоборот, по заданным смещениям найти приложенные к конструкции силы. Модель включает в себя геометрические, статические и физические соотношения и основывается на методе конечных элементов, где конечные элементы представляют треугольные симплексы.

*Ключевые слова:* геометрическая нелинейность, идеально пластичный материал, чистый изгиб, деформирование.

## Введение

В настоящее время в механике сплошной среды имеется значительное количество различных мер напряжений (тензор напряжений Коши [1–3], тензоры Пиолы–Кирхгофа первого и второго рода [2, 3]) и деформаций (тензоры Коши–Грина, Грина–Лагранжа, Альманси, Генки и т.д.) [1–5]. Такое разнообразие, конечно, дает определенную свободу в создании новых и усовершенствовании уже имеющихся моделей расчета конечных деформаций конструкций. Однако в большинстве случаев понимание физического смысла соотношений, используемых в этих моделях, затруднено, особенно, когда речь идет о конструкциях из неупругого материала, где кроме геометрической нелинейности имеет место физическая. Целью данной работы является разработка такой модели расчета конечных деформаций неупругой конструкции (в качестве примера выбран идеально пластичный материал), которая была бы основана на тензорах, наиболее понятных с точки зрения физического смысла их координат, а именно: на тензоре напряжений Коши  $\sigma$  и тензоре инженерной деформации  $\varepsilon$ , наследуемом из геометрически линейного подхода.

## Основные соотношения расчетной модели

Предложенная модель основана на методе конечных элементов, где элементы представляют треугольные симплексы. В рамках каждого элемента поле смещений является однородным и линейным, что обуславливает постоянство полей напряжений и деформаций. Однородность деформированного состояния элемента означает наличие линейной связи между начальными векторами волокон  $l_0$  этого элемента и векторами  $l$  в деформированном состоянии:

$$l = F \cdot l_0. \quad (1)$$

Оператор этой связи – тензор дисторсии  $F$ , координаты которого определяются векторами смещений узлов элемента. Выражение для дисторсии конструкции, состоящей из нескольких (например,  $k$ ) конечных элементов, удобно записывать в матричной форме:

$$[F] = [L] [q] + [I_1]. \quad (2)$$

В этом выражении  $[F]$  – это столбец, содержащий координаты тензоров дисторсии элементов, перечисленные последовательно в виде блоков

$$[F] = [[F_1 \ F_2 \ F_3 \ F_4]_1 \ [F_1 \ F_2 \ F_3 \ F_4]_2 \ \dots \ [F_1 \ F_2 \ F_3 \ F_4]_k]^T;$$

$[I_1]$  – столбец, содержащий блоки координат единичного тензора

$$[I_1] = [[1 \ 0 \ 0 \ 1] \ [1 \ 0 \ 0 \ 1] \ \dots \ [1 \ 0 \ 0 \ 1]]^T;$$

а  $[q]$  – столбец, содержащий смещения узлов конструкции

$$[q] = [q_1 \ q_2 \ \dots \ q_m]^T,$$

где число  $m$  – степень свободы конструкции. Матрица  $[L]$  размерностью  $4k \times m$  определяет связь между смещениями  $[q]$  и дисторсией  $[F]$ ; для каждой конструкции  $[L]$  постоянна и ее координаты не зависят от нагрузок или смещений.

<sup>1</sup> Щербакова Алла Олеговна – кандидат технических наук, доцент, кафедра Прикладной механики, динамики и прочности машин, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: AllaScherbakova@list.ru

Тензор дисторсии представляет скалярное произведение тензора жесткого поворота  $R$  и тензоров упругого  $U_e$  и неупругого  $U_p$  растяжения:

$$F = R \cdot U_e \cdot U_p, \quad U_e = I + \varepsilon_e, \quad U_p = I + \varepsilon_p, \quad (3)$$

здесь тензоры  $\varepsilon_e$  и  $\varepsilon_p$  – это тензоры упругой и неупругой деформации соответственно, а  $I$  – единичный тензор. В матричной форме тензоры  $U_e$ ,  $U_p$ ,  $\varepsilon_e$  и  $\varepsilon_p$  записываются в виде столбцов (по аналогии с дисторсией) с учетом симметрии. Например  $[\varepsilon_e]$  – это столбец размерностью  $3k$ , который содержит компоненты тензоров упругих деформаций ( $\varepsilon_1$  и  $\varepsilon_3$  – продольные деформации,  $\varepsilon_2$  – сдвиговая)  $k$  элементов конструкции:

$$[\varepsilon] = [[\varepsilon_1 \ \varepsilon_2 \ \varepsilon_3]_1 \ [\varepsilon_1 \ \varepsilon_2 \ \varepsilon_3]_2 \ \dots \ [\varepsilon_1 \ \varepsilon_2 \ \varepsilon_3]_k]^T.$$

Тензор  $R$  определяется единственным параметром – углом жесткого поворота  $\varphi$ , отложенным против часовой стрелки

$$R = (e_1 e_1 + e_2 e_2) \cos \varphi + (e_2 e_1 - e_1 e_2) \sin \varphi,$$

а угол  $\varphi$  при известном тензоре  $F$  и, например,  $U_p$  определяется следующим образом:

$$\varphi = \arctg[(F_3 U_{p3} - F_4 U_{p2} + F_1 U_{p2} - F_2 U_{p1}) / (F_1 U_{p3} - F_2 U_{p2} + F_3 U_{p2} - F_4 U_{p1})].$$

Тензор упругой деформации, который понадобится позже для расчета напряжений и усилий, согласно выражениям (3) имеет вид

$$\varepsilon_e = U_e - I = R^T \cdot F \cdot U_p^{-1} - I.$$

Для конструкции это выражение записывается в матричной форме:

$$[\varepsilon_e] = [B] [F] - [I_2]. \quad (4)$$

Здесь матрица  $[B]$  размерностью  $3k \times 4k$  определяет связь между дисторсией и упругими деформациями конструкции в зависимости от смещений ее узлов и накопленной пластической деформации, а столбец  $[I_2]$  содержит координаты единичного тензора и имеет размерность  $3k$ :

$$[I_2] = [[1 \ 0 \ 1] \ [1 \ 0 \ 1] \ \dots \ [1 \ 0 \ 1]]^T.$$

Свойства материала описываются моделью идеальной пластичности. Согласно этой модели при упругом деформировании интенсивность напряжений  $\sigma_1$  (длина вектора напряжений в девiatorном пространстве) меньше радиуса поверхности текучести  $R_\sigma$  (найденного по пределу текучести при растяжении  $\sigma_T$  и, следовательно, равного величине  $\sqrt{2/3} \sigma_T$ ), а при пластическом деформировании  $\sigma_1 = R_\sigma$ ; при этом упругие деформации связаны с напряжениями законом Гука:

$$\sigma = C \cdot \varepsilon_e,$$

где  $C$  – тензор констант упругости. Для конструкции закон Гука приобретает матричный вид

$$[\sigma] = [C] [\varepsilon_e], \quad (5)$$

где столбец  $[\sigma]$  размерностью  $3k$  содержит компоненты тензоров напряжений Коши ( $\sigma_1$  и  $\sigma_3$  – нормальные напряжения,  $\sigma_2$  – касательное) элементов конструкции:

$$[\sigma] = [[\sigma_1 \ \sigma_2 \ \sigma_3]_1 \ [\sigma_1 \ \sigma_2 \ \sigma_3]_2 \ \dots \ [\sigma_1 \ \sigma_2 \ \sigma_3]_k]^T,$$

а матрица  $[C]$  размерностью  $3k \times 3k$  содержит константы упругости материала ( $E$  – модуль упругости и  $\mu$  – коэффициент Пуассона).

Плоская конструкция, состоящая из набора треугольных элементов, может быть представлена в виде наложенного на нее «корсета» – фермы, стержни которой шарнирно связаны в узлах и определяют сетку конечных элементов. Они могут растягиваться или сжиматься, но не могут изгибаться, что обеспечивает однородность напряженно-деформированного состояния элементов. Тензор напряжений элемента с помощью граничных условий позволяет найти распределенные силы, действующие на его сторонах, а наличие корсета – заменить систему этих распределенных сил сосредоточенными силами, приложенными к узлам корсета. Для произвольной плоской конструкции выражение, связывающее напряжения элементов и узловые силы имеет следующий вид:

$$[Q] = [H][\sigma], \quad (6)$$

где столбец  $[Q]$  содержит координаты сил, приложенных к узлам конструкции:

$$[Q] = [Q_1 \ Q_2 \ \dots \ Q_m]^T$$

(по аналогии со смещениями  $[q]$ ), а матрица  $[H]$  связывает координаты тензоров напряжений элементов конструкции с координатами сил, приложенных к узлам конструкции в ее деформированном состоянии. Очевидно, что матрица  $[H]$  зависит от смещений, так как равновесие элемента рассматривается в деформированном состоянии.

При кинематическом нагружении конструкции (то есть при известных смещениях узлов) расчет ведется шагами по времени, при этом на каждом шаге используются пластические деформации, найденные на предыдущем шаге расчета.

Схема расчета при кинематическом нагружении

1. Номер шага нагружения  $n = 1$ .

2. Начальные пластические растяжения  $[U_p^*] = [I_2]$ .

3. Смещения на текущем шаге  $[q_n]$ .

4. Функция уточнения пластических растяжений:  $[U_{pn}] = f(q_n, U_p^*)$ :

a. Дисторсии  $[F] = [L][q_n] + [I_1]$ ;

b. Приближенные упругие деформации и напряжения:

$$[\varepsilon_e^*] = [B(q, U_p^*)][F] - [I_2], \quad [\sigma^*] = [C][\varepsilon_e^*];$$

c. Приближенный вектор напряжения  $[s]$  в девятимерном пространстве и его модуль  $\sigma_i^*$  (интенсивность напряжений). Для конечного элемента с координатами тензора напряжений  $\sigma_1^*$ ,  $\sigma_2^*$  и  $\sigma_3^*$  получим

$$s_1 = \frac{1}{\sqrt{6}} (\sigma_1^* + \sigma_3^*), \quad s_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_1^* - \sigma_3^*), \quad s_3 = \sqrt{2} \sigma_2^*, \quad \sigma_i^* = (s_1^2 + s_2^2 + s_3^2)^{1/2};$$

d. Если в каком-либо элементе конструкции  $\sigma_i^* > R_\sigma$ , тогда укорачиваем вектор  $s$  до размера  $R_\sigma$ , затем уточняем координаты тензора напряжений  $\sigma$ ;

e. Координаты тензоров упругих растяжений

$$[U_e] = [C]^{-1}[\sigma] + [I_2];$$

f. Координаты тензоров пластических растяжений

$$[U_{pn}] = [D(q_n, U_e)][F]$$

(здесь матрица  $[D]$  выражает связь между пластическими растяжениями и дисторсией элементов конструкции);

g. Если  $\sigma_i^* \leq R_\sigma$ , тогда не меняем координаты тензоров пластических растяжений

$$[U_{pn}] = [U_p^*].$$

5. Координаты тензоров пластических растяжений после поворота элемента как жесткого целого  $[V_{pn}]$ . Например, для одного элемента

$$[V_{pn}] = [R_n]^T [U_{pn}] [R_n].$$

6. Координаты тензоров упругих растяжений после поворота элемента как жесткого целого

$$[V_{en}] = [B(q_n, V_{pn})][F].$$

7. Вычисляем напряжения  $[\sigma_n] = [C]([V_{en}] - [I_2])$ .

8.  $[Q_n] = [H(q_n)][\sigma_n]$ .

9.  $[U_p^*] = [U_{pn}]$ ,  $n = n + 1$ , возвращаемся к п. 3.

Расчет силового нагружения конструкции также ведется шагами по времени, при этом приходится использовать численные методы решения системы нелинейных уравнений

$$[q] = [K]^{-1}([Q] - [b]),$$

где

$$[K] = [H][C][B][L], \quad [b] = [H][C]([B][I_1] - [I_2]).$$

### Верификация модели

С целью верификации предложенной расчетной модели в работе были сопоставлены величины изгибающих моментов  $M^*$ , возникающих в прямоугольной балке при ее чистом изгибе, вычисленные с помощью предложенной модели, а также моменты

$$M_1 = Eh^3/(12\rho), \quad M_2 = (\sigma_T h^3 / 4) - \sigma_T^3 \rho^2 / (3E^2),$$

вычисленные с использованием точных решений, известных из курса сопротивления материалов. Здесь  $M_1$  – это момент, вычисленный при упругом деформировании балки, а  $M_2$  – за пределами упругости,  $E$  – модуль упругости материала,  $\rho$  – радиус кривизны балки,  $h$  – высота балки. В расчетах использовали следующие исходные данные: материал балки – изотропный, идеально пластичный ( $E = 2 \cdot 10^5$  МПа,  $\sigma_T = 10$  ГПа, коэффициент Пуассона  $\mu$  для простоты принят равным нулю),  $h = 8$  м, длина балки  $l = 15$  м, толщина балки равна 1 м, напряженное состояние – плоское, высота конечного элемента – 0,5 м.

На рис. 1 приведена схема балки в начальном состоянии (с разбивкой на конечные элементы) и в конечном, а на рис. 2 показаны зависимости изгибающих моментов от  $\alpha$  – угла поворота пра-

вого торца балки. Расчет показал, что отличие между предложенным решением и соответствующим точным решением не превышает 1 %.

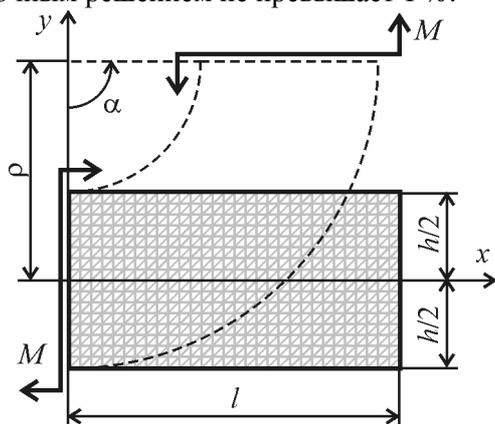


Рис. 1. Схема чистого изгиба балки при  $\mu = 0$

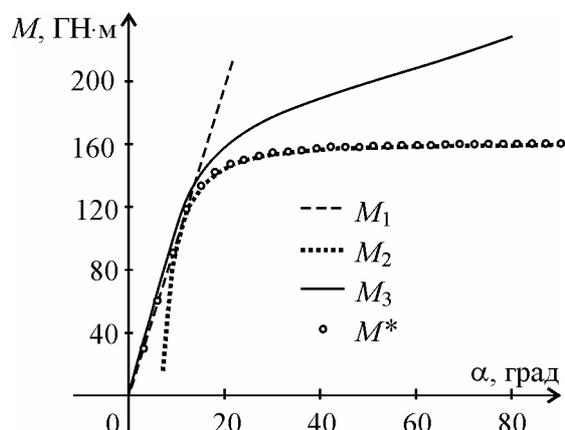


Рис. 2. Зависимости изгибающих моментов от угла  $\alpha$   $M_1$  и  $M_2$  — точные решения;  $M^*$  — решение с помощью предложенной модели;  $M_3$  — решение с помощью пакета ANSYS

Для сравнения на рис. 2 показано изменение изгибающего момента  $M_3$ , возникающего при чистом изгибе балки, вычисленное с помощью пакета прикладных программ ANSYS (в расчете использовали квадратные элементы plane182 соответствующего размера). Геометрические параметры конструкции и свойства материала использовали те же, что и в расчете с помощью предложенной модели. Расчет показал не только количественное, но и качественное различие между решением рассмотренной задачи в пакете ANSYS и точным решением: с увеличением  $\alpha$  значение момента  $M_3$  не стабилизируется на величине  $16 \cdot 10^{10}$  Нм, а продолжает расти. Это объясняется использованием в пакете ANSYS тензора логарифмической деформации, который при повороте главных осей конечных элементов в результате деформирования, теряет физический смысл [6–8].

### Заключение

Предложена расчетная модель позволяющая, зная нагрузки, приложенные к плоской конструкции из идеально пластичного материала, найти соответствующие смещения ее точек и, наоборот, по заданным смещениям найти приложенные к конструкции силы. Модель включает в себя геометрические, статические и физические соотношения и основывается на методе конечных элементов. В качестве меры напряжений используется тензор напряжений Коши, а меру деформаций представляет тензор инженерной деформации.

Для верификации предложенной модели выполнен расчет деформирования балки при чистом изгибе. Сопоставление результатов расчета с соответствующим точным решением, известным из курса сопротивления материалов, позволяет сделать вывод об адекватности предложенной модели (различие между величинами изгибающих моментов, полученными двумя методами, составляет не более 1 %).

### Литература

1. Truesdell, K. A first course in rational continuum mechanics / K. Truesdell. Baltimore: The Johns Hopkins University, 1972. – 264 p.
2. Chadwick, P. Continuum mechanics: concise theory and problems (2 ed.) / P. Chadwick. – Dover publications, 1998. – 193 p.
3. Belytschko, T. Nonlinear finite elements for continua and structures / T. Belytschko, W.K. Lin, B. Moran. – New York: John Wiley and sons, 2000. – 660 p.
4. Mase, G. Theory and problems of continuum mechanics / G. Mase. – New-York: McGraw-Hill Book Company, 1970. – 221 p.
5. An objective time-integration procedure for isotropic rate-independent rate-dependent elastic-plastic constitutive equations / G.G. Weber, A.M. Lush, T.A. Zavaliangos, L. Anand // International journal of plasticity. – 1990. – Vol. 6. – P. 701–744.

6. Садаков, О.С. Конечные деформации в механике деформируемого твердого тела / О.С. Садаков // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2005. – Вып. 6. – №6(46). – С. 114–121.

7. Садаков, О.С. К расчетам напряженно-деформированного состояния конструкций в геометрически нелинейной постановке/ О.С. Садаков // Труды Международной конференции «Снежинск и наука. – 2003. Современные проблемы атомной науки и техники». – Снежинск: СГФТА, 2003. – С. 73–74.

8. Буслаева, О.С. Скаляр и тензор логарифмической деформации / О.С. Буслаева, О.С. Садаков, А.А. Шапиро // Научно-технические ведомости СПбГТУ. – 2003. – № 3(33). – С. 125–129.

Поступила в редакцию 16 июня 2013 г.

*Bulletin of the South Ural State University  
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"  
2014, vol. 6, no. 2, pp. 35–39*

## CALCULATION OF DEFORMATION FOR GEOMETRICALLY NONLINEAR PLANE STRUCTURE MADE OF PERFECT PLASTIC MATERIAL

**A.O. Scherbakova<sup>1</sup>**

A computational model given helps to find displacements of a structure, made of a perfect plastic material, using loads applied to this structure. On the other hand it can find loads applied to the structure using displacements given. The model includes geometrical, statical and physical relations and it is based on the finite element method where finite elements represent triangular simplexes.

*Keywords: geometrical nonlinearity, perfect plastic material, pure bending, deformation.*

### References

1. Truesdell, K. *A first course in rational continuum mechanics*. Baltimore: The Johns Hopkins University, 1972. – 264 p.

2. Chadwick P. *Continuum mechanics: concise theory and problems (2 ed.)*. Dover publications, 1998. 193 p.

3. Belytschko T., Lin W.K., Moran B. *Nonlinear finite elements for continua and structures*. New York, John Wiley and sons, 2000. ISBN 0-471-98773-5. 660 p.

4. Mase G. *Theory and problems of continuum mechanics*. New-York: McGraw-Hill Book Company, 1970. 221 p.

5. Weber G.G., Lush A.M., Zavalianos T.A., Anand L. An objective time-integration procedure for isotropic rate-independent rate-dependent elastic-plastic constitutive equations. *International journal of plasticity*. 1990. Vol. 6. pp. 701–744.

6. Sadakov O.S. Konechnye deformatsii v mekhanike deformiruемого tverdogo tela (Finite deformations in mechanics of deformable solids). *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika, fizika, khimiya»*. 2005. Issue 6. no. 6(46). pp. 114–121. (in Russ.).

7. Sadakov O.S. K raschetam napryazhenno-deformirovannogo sostoyaniya konstruktsiy v geometricheski nelineynoy postanovke (To the calculation of tensed deformable state of the structure in geometrically nonlinear performance). *Trudy Mezhdunarodnoy konferentsii «Snezhinsk i nauka – 2003. Sovremennye problemy atomnoy nauki i tekhniki»* (Proceedings of the International Conference "Snezhinsk and Science - 2003. Modern Problems of Nuclear Science and Engineering"). Snezhinsk: SGFTA, 2003. pp. 73–74. (in Russ.).

8. Buslaeva O.S., Sadakov O.S., Shapiro A.A. *Nauchno-tehnicheskie vedomosti SPbGTU*. 2003. no. 3(33). pp. 125–129. (in Russ.).

*Received 16 June 2013*

<sup>1</sup> Scherbakova Alla Olegovna is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, South Ural state university.

E-mail: AllaScherbakova@list.ru

## ТКАНЕВЫЙ КОМПОЗИТ. ОЦЕНКА УПРУГОДИССИПАТИВНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК

А.О. Щербакова<sup>1</sup>

Предложена математическая модель тканевого композита, позволяющая оценить его упругодиссипативные характеристики с использованием упругодиссипативных характеристик однонаправленного композита с теми же структурными компонентами (волокнами и матрицей) при той же объемной доле волокон. Согласно разработанной модели, представительный элемент тканевого композита рассматривается в виде последовательного и параллельного соединения ячеек, содержащих однонаправленный композит с различными направлениями укладки волокон. Кроме того, модель учитывает тип переплетения нитей в композите (рассмотрено полотняное переплетение, саржевое и сатиновое).

*Ключевые слова:* тканевый композит, характеристики упругости, коэффициент диссипации, полотняное переплетение, саржа, сатин.

### Введение

В настоящее время тканевые композиты широко используются в различных областях промышленности: из них изготавливают панели вагонов транспортных средств, элементы крыльев и фюзеляжа летательных аппаратов, емкости для транспортировки агрессивных сред, лопасти ветроэнергетических установок, вертолетов и т.д. [1, 2]. Подобная популярность тканевых композитов объясняется благоприятным сочетанием высоких характеристик жесткости и прочности вдоль волокон при относительно низкой трудоемкости их изготовления по сравнению с однонаправленными материалами.

Одной из важных задач на стадии разработки проекта конструкции является оценка эксплуатационных характеристик материала, что приводит к необходимости математического моделирования его свойств. Определению характеристик упругости тканевых композитов посвящены работы А.М. Скудры и Ф.Я. Булавса [3, 4], где материал рассматривается в виде двух условных монослоев основы и утка, однонаправлено армированных искривленными волокнами, а искривление волокон учитывается чередованием наклонно и продольно армированных полос. В настоящее время тканевые композиты, как правило, моделируют с использованием пакетов прикладных программ, основанных на использовании метода конечных элементов, таких как ANSYS, ABACUS, LS DYNA, NASTRAN и т.д. [5–9]. Однако возможности разработчиков подобных моделей ограничиваются сложностью структуры материала, так как тканевый композит состоит из матрицы и армирующей ткани, состоящей из нитей, которые в свою очередь состоят из волокон. Кроме того, иногда в расчеты включают интерфейсный слой между волокнами и матрицей. Подобное разнообразие неоднородностей ведет к необходимости ограничиваться одним из уровней детализации композита: макроуровнем, мезоуровнем, микроуровнем и т.д. На макроуровне тканевый композит рассматривают как однородный ортотропный материал. На мезоуровне – как неоднородную среду, состоящую из матрицы (связующего) и нитей, свойства которых обычно усредняют по правилу смесей [1–4], либо пренебрегают наличием матрицы в композите, оставляя при этом только волокна. На микроуровне приходится учитывать неоднородность нитей, состоящих, в свою очередь, из волокон и матрицы.

В данной работе предложена численная модель тканевого композита, где упругодиссипативные свойства материала определяются соответствующими свойствами однонаправленного композита с теми же структурными компонентами и объемной долей волокон (мезоуровень). Предложенная модель позволяет учесть тип переплетения нитей (полотно, саржа, сатин и др.).

<sup>1</sup> Щербакова Алла Олеговна – кандидат технических наук, доцент, кафедра Прикладная механика, динамика и прочность машин, Южно-Уральский государственный университет.  
E-mail: AllaScherbakova@list.ru

**Основные соотношения расчетной модели**

Согласно разработанной модели, тканевый композит схематизирован, как показано на рис.1 (в качестве примера рассмотрена ткань полотняного переплетения). В основе предложенной модели лежат следующие допущения:

1. Изогнутые участки нитей (волокон) заменены прямолинейными участками.
2. Структура материала регулярна, что позволяет ограничиться рассмотрением одного представительного элемента объема (жирные прямоугольники на рис. 1).
3. Представительный элемент объема - это набор ячеек, соединенных в цепь последовательно либо параллельно.
4. Каждая ячейка содержит однонаправленный композит с различной ориентацией волокон и с теми же структурными компонентами, что и тканевый композит.
5. Тип переплетения нитей (полотно, саржа, сатин) определяет только длину  $kl$  прямолинейных участков нитей, заданную с помощью коэффициента длины  $k$ , и не влияет на угол  $\theta$  наклонных участков нитей.
6. Волокна распределены по объему ячеек равномерно с одинаковым объемным содержанием.
7. Материал ячеек является сплошным, однородным, ортотропным и линейно упругим.
8. Напряженно-деформированное состояние ячеек однородно, то есть в процессе деформирования ячейки не искривляются, а нити (волокна) в ячейках остаются прямыми.
9. Рассмотрено плоское напряженное состояние ячеек.
10. Потери энергии в единице объема материала определяются суммой потерь энергии в каждой ячейке.
11. Отношение длин участков нити друг к другу определяется коэффициентом длины  $k$  (коэффициент  $k$ , равный единице, соответствует полотняному переплетению нитей, двум – саржевому переплетению, а восьми – сатиновому).

В основе предложенного метода лежит теория слоистых пластин [1–4, 10], согласно которой матрицы тензоров напряжений  $[\sigma]$ , деформаций  $[\varepsilon]$  и податливости  $[S]$  имеют следующий вид:

$$[\sigma] = \begin{bmatrix} \sigma_L \\ \tau_{LT} \\ \sigma_T \end{bmatrix}, \quad [\varepsilon] = \begin{bmatrix} \varepsilon_L \\ \gamma_{LT} \\ \varepsilon_T \end{bmatrix}, \quad [S] = \begin{bmatrix} \frac{1}{E_L} & 0 & -\frac{\mu_{LT}}{E_L} \\ 0 & \frac{1}{G_{LT}} & 0 \\ -\frac{\mu_{LT}}{E_L} & 0 & \frac{1}{E_T} \end{bmatrix}. \quad (1)$$

Здесь координата  $\sigma$  представляет нормальное напряжение в плоскости ортотропии,  $\tau$  – касательное напряжение,  $\varepsilon$  – линейную деформацию,  $\gamma$  – модуль сдвига,  $E$  – модуль упругости,  $G$  – модуль сдвига, а  $\mu$  – коэффициент Пуассона. Индекс «L» соответствует направлению вдоль волокон однонаправленного композита, «T» – поперек волокон, а индекс «LT» обозначает сдвиговое направление.

Удельная энергия диссипации  $\Delta W$  однонаправленного линейно упругого композита определяется выражением

$$\Delta W = \frac{1}{2} [\sigma]^T [\Psi] [\sigma], \quad (2)$$

где  $[\Psi]$  – это матрица упругодиссипативных характеристик (УДХ) по напряжениям:

$$[\Psi] = \begin{bmatrix} \frac{\psi_L}{E_L} & 0 & -\frac{\mu_{LT}\psi_L}{E_L} \\ 0 & \frac{\psi_{LT}}{G_{LT}} & 0 \\ -\frac{\mu_{LT}\psi_L}{E_L} & 0 & \frac{\psi_T}{E_T} \end{bmatrix}. \quad (3)$$

Здесь  $\psi_L$  – представляет коэффициент диссипации однонаправленного композита вдоль волокон,  $\psi_T$  – коэффициент диссипации поперек волокон, а  $\psi_{LT}$  – сдвиговой коэффициент диссипации.

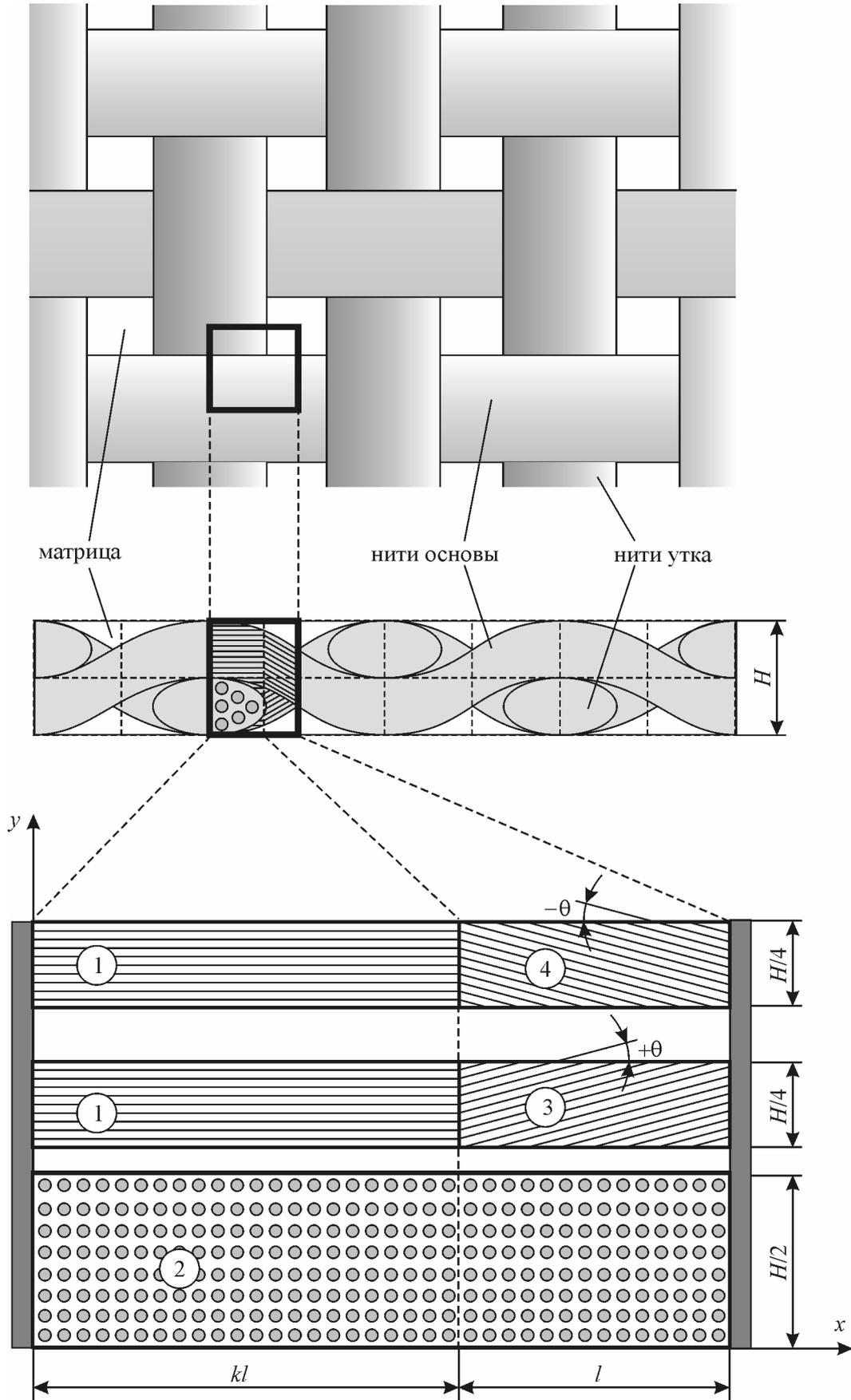


Рис.1. Схематизация тканевого композита

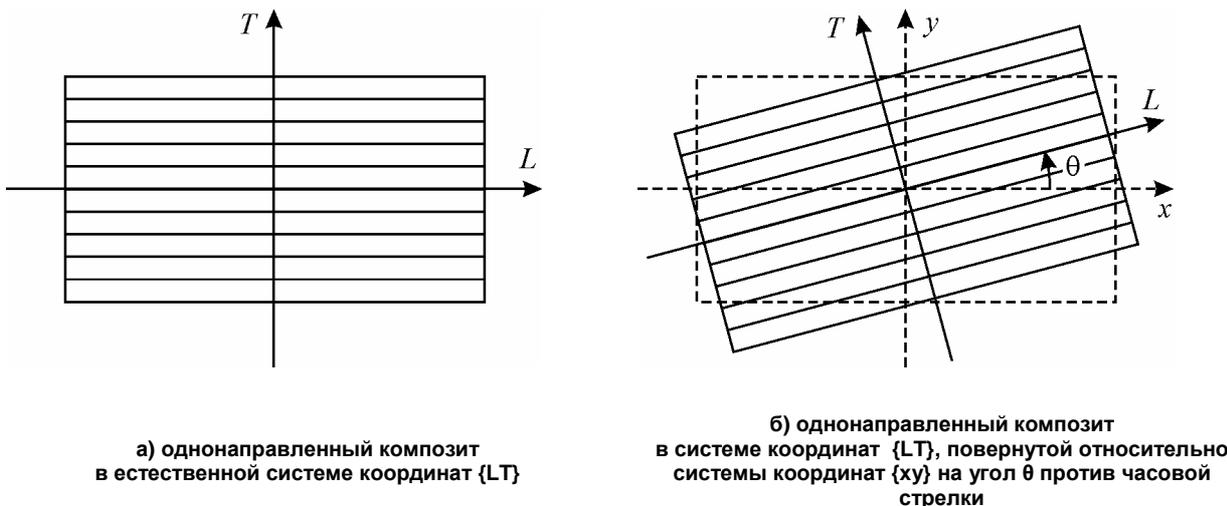


Рис. 2. Схема поворота осей координат монослоя

Для определения матриц УДХ и податливости однонаправленного композита в системе координат  $\{xy\}$  (рис. 2, б) достаточно заменить матрицу напряжений в формуле (2) следующим выражением:

$$[\sigma] = [R][\sigma^{(LT)}], \quad (4)$$

где матрица  $[\sigma^{(LT)}]$  – это матрица тензора напряжений однонаправленного композита в естественной системе координат  $\{LT\}$ , а матрица  $[R]$  – это матрица поворота на угол  $\theta$  по часовой стрелке

$$[R] = \begin{bmatrix} \cos^2 \theta & \sin \theta \cos \theta & \sin^2 \theta \\ -\sin \theta \cos \theta & \cos^2 \theta - \sin^2 \theta & \sin \theta \cos \theta \\ \sin^2 \theta & -\sin \theta \cos \theta & \cos^2 \theta \end{bmatrix}. \quad (5)$$

При этом матрицы податливости и УДХ в системе координат  $\{xy\}$  принимают вид:

$$[S^\theta] = [R][S^{(LT)}][R]^T, \quad [\Psi^\theta] = [R][\Psi^{(LT)}][R]^T, \quad (6)$$

а характеристики упругости и диссипации определяются следующими выражениями:

$$E_x^\theta = \frac{1}{S_{11}^\theta}, \quad E_y^\theta = \frac{1}{S_{33}^\theta}, \quad G_{xy}^\theta = \frac{1}{S_{12}^\theta}, \quad \mu_{xy}^\theta = -\frac{S_{13}^\theta}{S_{11}^\theta}, \quad (7)$$

$$\psi_x^\theta = \Psi_{11}^\theta E_x^\theta, \quad \psi_y^\theta = \Psi_{33}^\theta E_y^\theta, \quad \psi_{xy}^\theta = \Psi_{12}^\theta G_{xy}^\theta.$$

Для вывода выражений, определяющих характеристики упругости пластика, армированного тканью, полагали, что при деформировании материала в направлении оси  $x$  ячейки № 1 и № 3 (а также № 1 и № 4) соединены друг с другом последовательно, а блоки ячеек № 1 и № 3, № 1 и № 4 и № 2 работают параллельно, как показано на рис. 1. При деформировании материала в направлении оси  $y$ , а также в сдвиговом направлении полагали, что все ячейки работают параллельно. В результате были получены следующие выражения для определения модулей упругости  $E_x$  и  $E_y$ , модуля межслойного сдвига  $G_{xy}$ , а также коэффициентов Пуассона  $\mu_{xy}$  и  $\mu_{yx}$ :

$$E_x = \frac{(k+1)E_L E_x^\theta + E_T}{2(E_L + kE_x^\theta)} + \frac{E_T}{2}, \quad E_y = \frac{(2k+1)E_T + E_y^\theta}{2(k+1)}, \quad (8)$$

$$G_{xy} = \frac{k(G_{LT} + G_{TT}) + G_{xy}^\theta + G_{TT}}{2(k+1)}, \quad \mu_{xy} = \frac{(k+1)\mu_{LT}\mu_{xy}^\theta + \mu_{TT}}{2(\mu_{LT} + k\mu_{xy}^\theta)} + \frac{\mu_{TT}}{2}, \quad \mu_{yx} = \frac{E_y}{E_x} \mu_{yx}.$$

Здесь  $G_{TT}$  – это модуль сдвига ячеек № 2 в плоскости  $\{xy\}$ , а  $\mu_{TT}$  – соответствующий коэффициент Пуассона.

## Механика

Коэффициенты диссипации материала  $\psi_x$ ,  $\psi_y$  и  $\psi_{xy}$  в системе координат  $\{xy\}$  определяются путем подстановки в выражения (8) модулей упругости, отнесенных к соответствующим коэффициентам диссипации:

$$\psi_x = E_x \left[ \frac{(k+1)E_L E_x^\theta \psi_L \psi_x^\theta}{2\psi_L \psi_x^\theta [E_L \psi_x^\theta + kE_x^\theta \psi_L]} + \frac{E_T}{2\psi_T} \right]^{-1}, \quad \psi_y = E_y \left[ \frac{2k+1}{2(k+1)} \frac{E_T}{\psi_T} + \frac{1}{2(k+1)} \frac{E_y^\theta}{\psi_y^\theta} \right]^{-1}, \quad (9)$$

$$\psi_{xy} = G_{xy} \left[ \frac{k}{2(k+1)} \left( \frac{G_{LT}}{\psi_{LT}} + \frac{G_{TT}}{\psi_{TT}} \right) + \frac{1}{2(k+1)} \frac{G_{xy}^\theta}{\psi_{xy}^\theta} + \frac{1}{2(k+1)} \frac{G_{TT}}{\psi_{TT}} \right]^{-1}.$$

Здесь  $\psi_{TT}$  – это сдвиговый коэффициент диссипации ячеек № 2 в плоскости  $\{xy\}$ .

### Обсуждение результатов

В работе были вычислены зависимости УДХ тканевых композитов в зависимости от коэффициента длины нитей. В качестве исходных данных для расчетов использовали характеристики однонаправленного стеклопластика GLASS/DX210, взятые из работы [11] и приведенные в табл. 1. Модуль сдвига  $G_{TT}$  определили с учетом квазиизотропии материала ячеек № 2 в плоскости  $\{xy\}$ , приняв коэффициент Пуассона  $\mu_{TT}$  равным  $\mu_{LT}$ , а сдвиговый коэффициент диссипации  $\psi_{TT}$  приняв равным  $\psi_T$ . Угол  $\theta$  определили с использованием микрофотографий срезов тканевого композита, взятых из работы [12], он составил примерно  $25^\circ$ . При схематизации материала полагали, что тип переплетения нитей влияет только на величину коэффициента длины, тогда как угол  $\theta$  от него не зависит, а число нитей основы и утка совпадает.

Таблица 1

УДХ однонаправленного стеклопластика GLASS/DX210

Наименование параметра	Модули упругости		Модули сдвига		Коэффициенты Пуассона		Коэффициенты диссипации				
	Обозначение	$E_L$ , ГПа	$E_T$ , ГПа	$G_{LT}$ , ГПа	$G_{TT}$ , ГПа	$\mu_{LT}$	$\mu_{TT}$	$\psi_L$ , %	$\psi_T$ , %	$\psi_{LT}$ , %	$\psi_{TT}$ , %
Величина		37,8	10,1	4,9	4,0	0,29	0,29	0,87	6,1	6,9	6,1

Таблица 2

УДХ тканевых стеклопластиков

Тип переплетения нитей	Модули упругости		Модуль сдвига	Коэффициент Пуассона	Коэффициенты диссипации		
	продольный	поперечный			продольный	поперечный	сдвиговый
	$E_x$ , ГПа	$E_y$ , ГПа	$G_{xy}$ , ГПа	$\mu_{xy}$	$\psi_x$ , %	$\psi_y$ , %	$\psi_{xy}$ , %
Полотно	11,1	8,92	5,56	0,36	5,66	6,18	6,40
Саржа	12,9	9,32	5,18	0,33	5,19	6,15	6,44
Сатин	17,9	9,84	4,66	0,30	3,48	6,17	6,49

Результаты расчетов УДХ приведены на рис. 3 (рис. 3, а отражает зависимости модулей упругости  $E_x$ ,  $E_y$  и  $G_{xy}$  материала от коэффициента  $k$ , рис. 3, б – коэффициентов диссипации  $\psi_x$ ,  $\psi_y$  и  $\psi_{xy}$ , а рис. 3, в – коэффициентов Пуассона  $\mu_{xy}$  и  $\mu_{yx}$ ). Точки на рис. 3 соответствуют различным типам переплетения нитей (круги – полотняное переплетение, квадраты – саржевое, а треугольники – сатиновое). Величины УДХ тканевого материала, вычисленные с использованием предложенной модели, в зависимости от типа переплетения нитей приведены в табл. 2.

Расчеты показали, что продольный модуль упругости тканевого композита снизился примерно в 2–3 раза по сравнению с однонаправленным материалом, тогда как продольный коэффициент диссипации существенно возрос (примерно в 3–5 раз). Это объясняется, во-первых, наличием у тканевого композита нитей, расположенных в двух перпендикулярных направлениях (основа и уток), а во-вторых, наличием у нитей наклонных участков (ячейки 3 и 4 на рис. 1). При растяжении тканевого композита в направлении оси  $x$  угол наклона нитей основы уменьшается – происходит распрямление нитей основы, при этом нити утка деформируются в поперечном направлении, которому соответствует низкая жесткость и высокий коэффициент диссипации (по сравнению с соответствующими характеристиками в направлении нитей основы). Аналогичная ситуация возникает при растяжении материала в направлении нитей утка.

Сравнение трех различных типов переплетения нитей показало, что наибольшей жесткостью обладает материал, армированный тканью сатинового переплетения. Продольный модуль упругости сатинового композита на 61 % выше по сравнению с композитом, армированным тканью полотняного переплетения. При этом продольный коэффициент диссипации сатинового композита принимает наименьшее значение (на 40 % меньше, чем у полотняного композита). Это объясняется соотношением длин наклонного и прямого участков нитей: чем меньше размер  $l$  ячеек с наклонными волокнами по сравнению с общей длиной представительного объема  $(k+1)l$ , тем выше жесткость материала в продольном направлении и тем ниже соответствующий коэффициент диссипации. Величины поперечного и сдвигового коэффициентов диссипации (также как и соответствующие модули упругости) практически не зависят от типа переплетения нитей.

### Заключение

В работе предложена расчетная модель, позволяющая с использованием УДХ однонаправленного композита оценить УДХ тканевых композитов с теми же структурными компонентами при той же объемной доле волокон. Согласно разработанной модели, представительный элемент тканевого материала рассматривается в виде последовательного и параллельного соединения ячеек, содержащих однонаправленный композит с теми же структурными компонентами при той же объемной доле волокон. Модель позволяет учитывать тип переплетения нитей.

С использованием предложенной модели в работе выполнены расчеты УДХ тканевого стеклопластика на основе данных об однонаправленном стеклопластике GLASS/DX210. Расчеты показали, что с точки зрения диссипативных характеристик в продольном направлении однонаправленный композит значительно уступает тканевым материалам, тогда как с точки зрения характеристик упругости ситуация противоположна. Продольный коэффициент демпфирования тканевых композитов примерно в 3–5 раз выше, чем продольный коэффициент демпфирования однонаправленного стеклопластика с теми же структурными компонентами при той же объемной доле волокон. Продольный модуль упругости тканевых композитов при этом снизился примерно в 2–3 раза по сравнению с соответствующим однонаправленным материалом.

Сравнение трех типов переплетения армирующей ткани (полотняное переплетение, саржевое и сатиновое) показало, что наибольшей жесткостью обладает материал, армированный тканью сатинового переплетения: продольный модуль упругости сатинового композита на 61 % выше по сравнению с композитом, армированным тканью полотняного переплетения. Продольный коэффициент диссипации сатинового композита при этом принимает наименьшее значение (на 40 % меньше, чем у композита с полотняным типом переплетения).

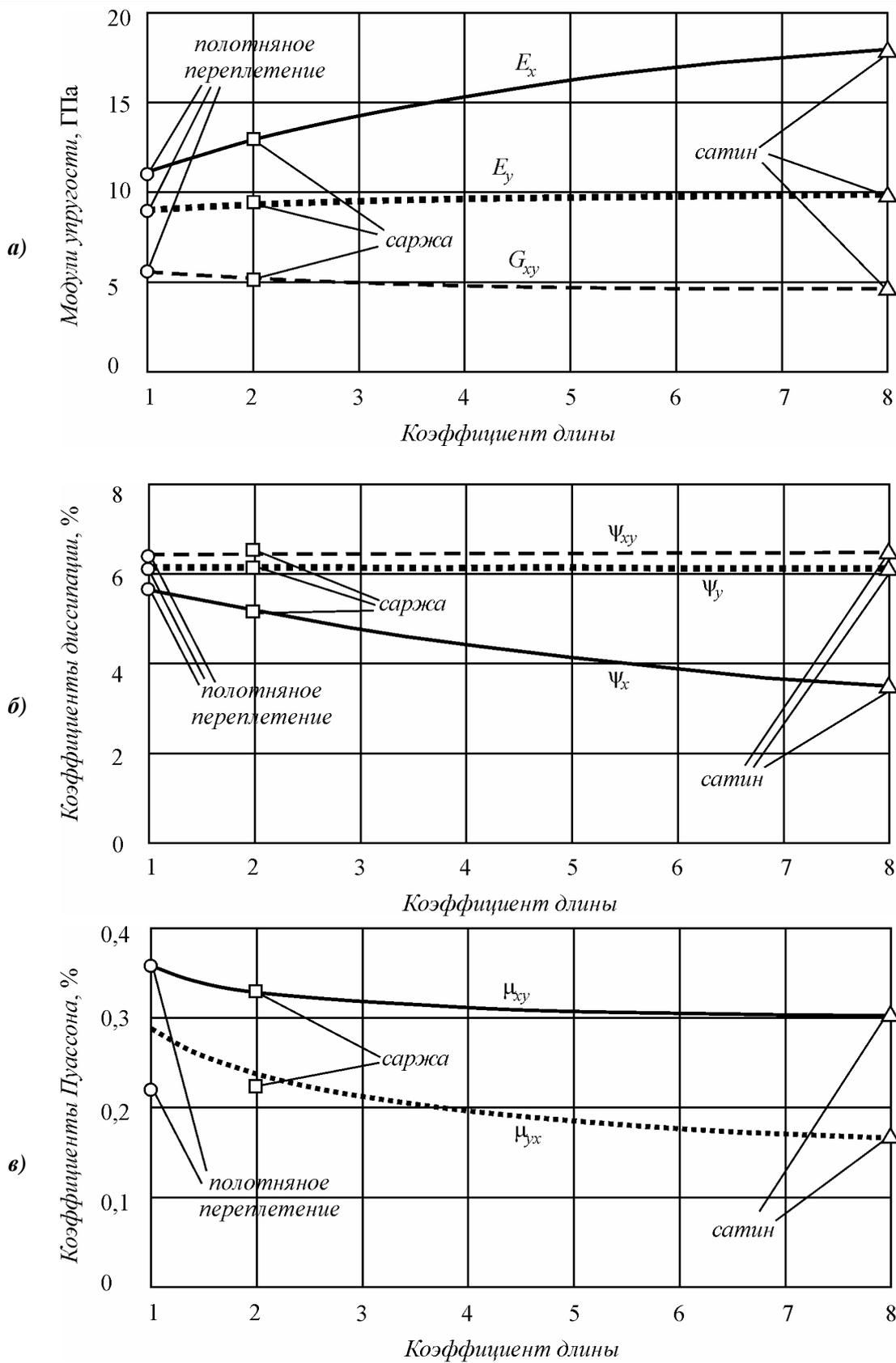


Рис. 3. Зависимость УДХ тканевых стеклопластиков от коэффициента длины нитей

**Благодарности**

Работа выполнялась при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках комплексного проекта «Создание высокотехнологичного производства модельного ряда энергосберегающих низкопольных трамвайных вагонов модульной конструкции» по договору № 02.G36.31.0002 между Министерством образования и науки РФ и ФГУП ГКНПЦ им. М.В. Хруничева в кооперации с головным исполнителем НИОКТР – ФГБОУ ВПО ЮУрГУ (НИУ).

**Литература**

1. Mallick, P.K. Fiber-reinforced composites. Materials, Manufacturing and Design / P.K. Mallick. – CRC press. Taylor and Francis Group, 2008. – 619 p.
2. Gibson, R.F. Principles of composite material mechanics / R.F. Gibson. – CRC press. Taylor and Francis Group, 2007. – 579 p.
3. Скудра, А.М., Прочность армированных пластиков / А.М. Скудра, Ф.Я. Булавс. – М: Химия, 1982. – 216 с.
4. Композиционные материалы. Справочник / под ред. В.В. Васильева. – М: Машиностроение. – 1990. – 512 с.
5. Gibson, R.F. Prediction of fiber-matrix interphase effects on damping of composites using micromechanical strain energy. Finite element approach / R.F. Gibson, S.J. Hwang // Composites Engineering. – 1993. – Vol. 3, Issue 10. – P. 975–984.
6. Geometric and mechanical modelling of 3D woven composites / S. Rudov-Clark, S.V. Lomov, M.K. Bannister *et al.* // Proceedings of the 14th International Conference on Composite Materials, San Diego, USA, 14–18 July 2003.
7. Bogdanovich, A.E. Multi-scale modeling, stress and failure analyses of 3-D woven composites / A.E. Bogdanovich // Journal of Materials Science. – 2006. – Vol. 41, № 20. – P. 6547–6590.
8. Zako, M. Finite element analysis of damaged woven fabric composite materials / M. Zako, Y. Uetsujib, T. Kurashikia // Composites Science and Technology. – 2003. – Vol. 63, № 7. – P. 507–516.
9. Nicoletto, G. Failure mechanisms in twill-weave laminates: FEM predictions vs. experiments / G. Nicoletto, E. Riva // Composites Part A. – 2004. – Vol. 35, № 7-8. – P. 787–795.
10. Зиновьев, П.А. Диссипация энергии при колебаниях тел из волокнистых полимерных материалов. Структурная модель / П.А. Зиновьев, Ю.Н. Ермаков // Применение пластмасс в машиностроении. – 1986. – С. 37–54.
11. Ni, R.G., The damping and dynamic moduli of symmetric laminated composite beams. Theoretical and experimental results / R.G. Ni, R.D. Adams // Compos. Sci. Technol. – 1984. – № 18. – pp. 104–121.
12. The mechanical properties of woven tape all-polypropylene composites / A. Alcock, N.O. Cabrera, N.-M. Barcoula *et al.* // Composites. Part A. – 2007. – Vol. 38. – Issue 1. – P. 147–161.

*Поступила в редакцию 15 июля 2013 г.*

## ELASTIC AND DISSIPATIVE PROPERTIES ESTIMATION FOR A WOVEN COMPOSITE

A.O. Scherbakova<sup>1</sup>

The article considers a mathematical model for a woven composite that allows us to estimate its elastic and dissipative properties using elastic and dissipative properties of unidirectional composite having the same structural components (matrix and fibers) and a fiber volume fraction. According to the developed model a representative element of woven composite is considered to be a set of cells connected in series and in parallel and containing unidirectional composite with different directions of fiber laying. Moreover, the model takes into account a type of weave construction: plane weave, twill or satin.

*Keywords: woven composite, elastic properties, dissipation factor, plane weave, twill, satin.*

### References

1. Mallick P.K. *Fiber-reinforced composites. Materials, Manufacturing and Design*. CRC press. Taylor and Francis Group, 2008. 619 p.
2. Gibson R.F. *Principles of composite material mechanics*. CRC press. Taylor and Francis Group, 2007. 579 p.
3. Skudra A.M., Bulavs F.Ya. *Prochnost' armirovannykh plastikov (Reinforced plastic strength)*. Moscow, Khimiya Publ., 1982. 216 p. (in Russ.).
4. Vasil'ev V.V. (Ed.) *Kompozitsionnye materialy. Spravochnik (Composite materials. Reference book)*. Moscow, Mashinostroenie, 1990. 512 p. (in Russ.).
5. Gibson R.F., Hwang S.J. Prediction of fiber-matrix interphase effects on damping of composites using micromechanical strain energy. Finite element approach. *Composites Engineering*. 1993. Vol. 3, Issue 10. pp. 975–984.
6. Rudov-Clark S., Lomov S.V., Bannister M.K., Mouritz A.P., Verpoest I. Geometric and mechanical modelling of 3D woven composites. *Proceedings of the 14th International Conference on Composite Materials, San Diego, USA*. 14–18 July 2003.
7. Bogdanovich A.E. Multi-scale modeling, stress and failure analyses of 3-D woven composites. *Journal of Materials Science*. 2006. Vol. 41, no. 20. pp. 6547–6590.
8. Zako M., Uetsujib Y., Kurashikia T. *Finite element analysis of damaged woven fabric composite materials*. Composites Science and Technology. 2003. Vol. 63, no. 7. pp. 507–516.
9. Nicoletto G., Riva E. Failure mechanisms in twill-weave laminates: FEM predictions vs. experiments. *Composites Part A*. 2004. Vol. 35, no. 7-8. pp. 787–795.
10. Zinov'ev P.A., Ermakov Yu.N. *Primenenie plastmass v mashinostroenii*. 1986. pp. 37–54. (in Russ.).
11. Ni R.G., Adams R.D. The damping and dynamic moduli of symmetric laminated composite beams. Theoretical and experimental results. *Compos. Sci. Technol*. 1984. no. 18. pp. 104–121.
12. Alcock B., Cabrera N.O., Barkoula N.-M., Spoelstra A.B., Loos J., Peijs T. The mechanical properties of woven tape all-polypropylene composites. *Composites. Part A*. 2007. Vol. 38. Issue 1. pp. 147–161. <http://dx.doi.org/10.1016/j.compositesa.2006.01.003>

*Received 15 July 2013*

---

<sup>1</sup> Scherbakova Alla Olegovna is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, South Ural state university.  
E-mail: AllaScherbakova@list.ru

## ELABORATION OF ATOMIC MODEL FOR *AB INITIO* CALCULATION OF THE FERRITE / CEMENTITE INTERFACE<sup>1</sup>

A.V. Verkhovyykh<sup>2</sup>, K.Yu. Okishev<sup>3</sup>, A.A. Mirzoev<sup>4</sup>, D.A. Mirzaev<sup>5</sup>

The work describes constructing a supercell for *ab initio* modelling of ferrite/cementite interface in pearlite microstructure of iron-carbon alloys. Bagaryatskii type orientation relationship between the two phases was accepted, with habit plane  $(101)_c \parallel (112)_\alpha$ . Optimization of *ab initio* modelling parameters was also performed using WIEN2k package.

*Keywords:* ferrite, cementite, interface, Bagaryatskii relationship, *ab initio* modelling, supercell.

### Introduction

It is well known that solubility of carbon in the low-temperature bcc polymorphous modification of iron is very low, so that almost all carbon in commercial iron alloys (steels) usually containing 0,5 to 5 at. % C is present in the form of iron carbide  $\text{Fe}_3\text{C}$  (cementite) co-existing with almost pure alpha iron (ferrite). In slowly cooled steels cementite is a part of a structural constituent called pearlite, a mixture of thin lamellae of ferrite and cementite [1]. Average interlamellar spacing of pearlite formed isothermally from prior fcc gamma solid solution (austenite) depends on transformation temperature, ranging from 0,5...0,3  $\mu\text{m}$  when supercooling below the eutectoid temperature  $A_1 = 1000$  K is  $\Delta T = 30...50$  K to  $\sim 0,1$   $\mu\text{m}$  and even smaller if austenite is supercooled to about 830 K ( $\Delta T \approx 170$  K). Interlamellar spacing of pearlite significantly affects hardness and strength of steels [2].

Ferrite/cementite interfaces also play a role in trapping dissolved atoms of hydrogen. Hydrogen is one of important components in iron and steels. It has the smallest atomic radius among interstitial impurities (0,46 Å according to [3], which is confirmed by *ab initio* calculations [4]) and high diffusivity but low solubility in iron. From technical point of view hydrogen is a harmful impurity causing embrittlement, cracking etc. [5–7]. One of the ways of suppressing harmful effects of hydrogen is creating structural traps, *i.e.* positions where hydrogen atoms are bound and incapable of moving on the lattice [6–8]. One type of such traps are interphase interfaces, including  $\alpha/\text{Fe}_3\text{C}$  [6, 9].

Beside direct experimental studies, an important tool for quantitative analysis of hydrogen trapping is *ab initio* modelling. Previously the authors carried out such modelling of hydrogen interaction with substitutional impurity atoms [10] and vacancies [11, 12]. *Ab initio* modelling of hydrogen interaction with  $\alpha/\text{Fe}_3\text{C}$  interfaces requires determination of optimal modelling parameters and constructing a supercell describing the interface. This is the purpose of the present paper.

### Atomic model

It is well known that cementite has an orthorhombic lattice of *Pnma* space group. Unit cell with room-temperature parameters  $a = 4,524$ ;  $b = 5,088$ ;  $c = 6,741$  Å [13] contains 12 iron and 4 carbon atoms. Iron atoms occupy two crystallographically nonequivalent positions [14]: *G* (“general”):

<sup>1</sup> The work was supported by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation and by the Russian Foundation of Basic Research (grants no. 13-02-00048 and 14-03-00618).

<sup>2</sup> Verkhovyykh Anastasia Vladimirovna is Post-graduate Student, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.  
E-mail: uraeva@physics.susu.ac.ru

<sup>3</sup> Okishev Konstantin Yur'evich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Physical Metallurgy and Solid State Physics Department, South Ural State University.  
E-mail: okishev@physmet.susu.ac.ru

<sup>4</sup> Mirzoev Aleksandr Aminulaevich is Dr.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.  
E-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru

<sup>5</sup> Mirzaev Dzhahal Aminulovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Physical Metallurgy and Solid State Physics Department, South Ural State University.  
E-mail: mirzayev@physmet.susu.ac.ru

$$\pm [[x, y, z]]; \pm [[1/2-x, 1/2+y, z]]; \pm [[x, y, 1/2-z]]; \pm [[1/2-x, 1/2+y, 1/2-z]] \quad (1a)$$

and  $S$  ("special"):

$$\pm [[u, v, 1/4]]; \pm [[1/2-u, 1/2+v, 1/4]]. \quad (1b)$$

Carbon atoms located in the centres of "normal" prismatic interstices [15] have coordinates

$$\pm [[r, s, 1/4]]; \pm [[1/2-r, 1/2+s, 1/4]]. \quad (1c)$$

According to [16], parameters in eqs. (1) are  $x=0,333$ ;  $y=0,175$ ;  $z=0,065$ ;  $u=-0,167$ ;  $v=0,040$ ;  $r=0,43$ ;  $s=-0,13$ .

There are two main types of orientation relationships (OR) between ferrite and cementite in pearlite, namely the Bagaryatskii (Isaichev) and Pitsch OR. For pearlite formed at small supercoolings fractions of colonies having each of the two OR's are approximately equal, while with decreasing transformation temperature the probability of Bagaryatskii OR increases [17]. We will then concentrate our analysis on the Bagaryatskii type of OR. It supposes that the following planes are parallel in both phases:

$$(100)_c \parallel (0\bar{1}1)_\alpha; (010)_c \parallel (1\bar{1}\bar{1})_\alpha; (001)_c \parallel (211)_\alpha, \quad (2)$$

and the habit plane of lamellae is  $(101)_c \parallel (112)_\alpha$  [17–19].

Fig. 1 shows cementite lattice projected on the (010) plane. Planes (101) in the iron sublattice of cementite form 12-layer stacking with average interplanar spacing of  $\frac{1}{12}\sqrt{a^2 + c^2} = 0,677 \text{ \AA}$  (fig. 1).

There are two types of these planes containing  $G$  and  $S$  atoms. It is most probable that the  $(101)_c$  plane at the coherent ferrite/cementite interface will contain  $S$  type atoms because atomic pattern in  $S$  planes is more similar to that of  $(112)_\alpha$  planes [20].

For adequate description of macroscopic amounts of phases by *ab initio* modelling, periodic boundary conditions are to be set: the supercell in which electronic structure is calculated is supposed to be translated infinitely along all three axes. In order to provide integrity of the interface under these boundary conditions the interface has to be parallel to one of the faces of the supercell. In our case the coordinate system is to be changed in such a way that the habit plane  $(101)_c \parallel (112)_\alpha$  become parallel to one of coordinate planes. The supercell should consist of two parts, cementite and ferrite, each containing sufficient number of atomic planes to consider interaction of neighbouring interfaces insignificant.

Thus a reasonable way to construct the cementite part of the supercell is to change the three base vectors  $[a, 0, 0]$ ,  $[0, b, 0]$ ,  $[0, 0, c]$  to  $[-a, 0, c]$ ,  $[0, b, 0]$ ,  $[a, 0, c]$ , see fig. 2. The unit cell of cementite built up on new base vectors has the volume twice greater than the initial one and contains 32 atoms. The new cell is monoclinic; its parameters are  $a_1 = 8,118 \text{ \AA}$ ;  $b_1 = 5,088 \text{ \AA}$ ;  $c_1 = 8,118 \text{ \AA}$ ;  $\beta_1 = 2 \text{ atan}(a/c) = 67,73^\circ$ . It is also convenient to shift the origin of coordinates of the new cell along the initial  $x$  axis by  $(1/4 - 0,333) = -0,083 a$  in order to place the first  $S$  plane at  $z_1 = 0$  (see fig. 2).

The distance between the first and the last  $S$  planes in this cell (planes 0 and 13 in fig. 1) is  $1,083 c_1 = 8,792 \text{ \AA}$ . The distance from the last cementite  $S$  plane located at  $z_1 = 1,083$  to the first ferrite plane is to be chosen so that the average distance between iron atoms in these two planes be as close as possible to the interatomic distance in  $\alpha$  iron  $a_\alpha \sqrt{3}/2 = 2,482 \text{ \AA}$ , where  $a_\alpha = 2,866 \text{ \AA}$  is  $\alpha$  iron lattice parameter. This condition is fulfilled if the distance between the two planes is  $0,820 \text{ \AA}$  (*i.e.*  $0,109 c_1$ ) and the initial atom in the first ferrite plane is located at  $x_1 = 0,368$  и  $y_1 = 1/4$  being shifted from the  $S$  atom  $[[0,167 a_1; 0,040 b_1; 1,083 c_1]]$  of the last cementite plane by  $[0,201 a_1; 0,210 b_1; 0,109 c_1]$ . Distances between iron atoms in the two planes are then  $2,38...2,69 \text{ \AA}$ .

Interplanar distance for subsequent ferrite planes is to be  $a_\alpha/\sqrt{6} = 1,170 \text{ \AA}$ . Iron atoms in each next  $(112)_\alpha$  plane are shifted from the previous one by a vector  $\frac{1}{6}a_\alpha [5\bar{1}\bar{2}]$ ; in new coordinates it corresponds to  $[\frac{1}{4}a_1 - d \cos \beta, \frac{1}{3}b_1, (d/\sin \beta_1)c_1] = [0,195 a_1; \frac{1}{3}b_1; 0,156 c_1]$ .

Initial atom of the last ferrite plane is to be shifted from the initial  $S$  atom of the next (translated along  $z_1$ ) supercell by  $[-0,201 a_1; -0,210 b_1; -0,109 c_1]$ . Since this  $S$  atom has coordinates  $x_1 = 0,250$  and  $y_1 = 0,540$ , then the number of ferrite planes in the supercell is to be taken such as to make the coordinates of the atom of the last plane close to  $x_1 = 0,049$  and  $y_1 = 0,330$ . To provide this, seven ferrite planes are to be inserted, which yields the coordinates of the initial atom of the seventh plane  $x_1 = 0,040$  and  $y_1 = 0,250$ . If the distance between neighbouring ferrite and cementite planes is again taken  $0,886 \text{ \AA}$ , then the distances between iron atoms of the two planes are  $2,43...2,65 \text{ \AA}$ .

With the added seven ferrite planes the  $O_{1z_1}$  size of the supercell increases from  $c_1=8,118 \text{ \AA}$  to  $c_2=18,150 \text{ \AA}$ , *i.e.* 2,236 times. The supercell now contains 64 atoms: 56 iron (28 in both ferrite and cementite parts) and 8 carbon (in the cementite part). It is shown in fig. 3.

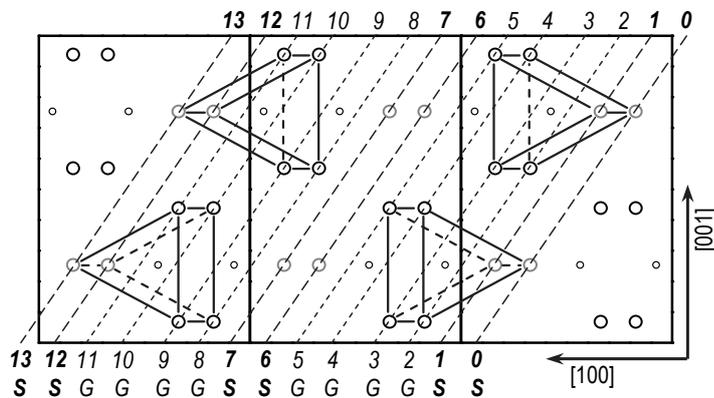


Fig. 1. Cementite lattice projected along [010]. Traces of (101) planes are shown and numbered. Iron atoms in S positions are drawn brighter; smaller circles are carbon atoms in the centres of "normal" prismatic interstices

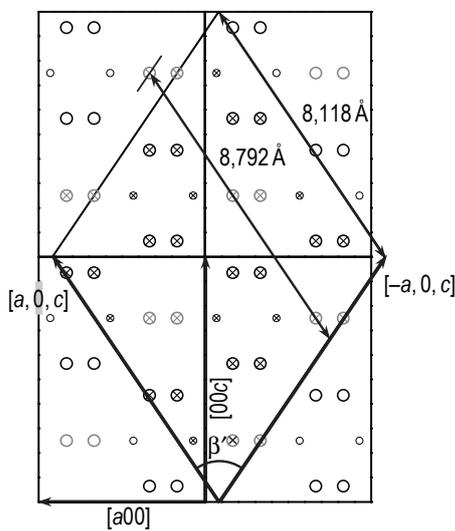


Fig. 2. Cementite lattice projected along [010] with base vectors of the initial orthorhombic and having double volume monoclinic unit cells. Crosses indicate atoms included in the cementite part of the supercell

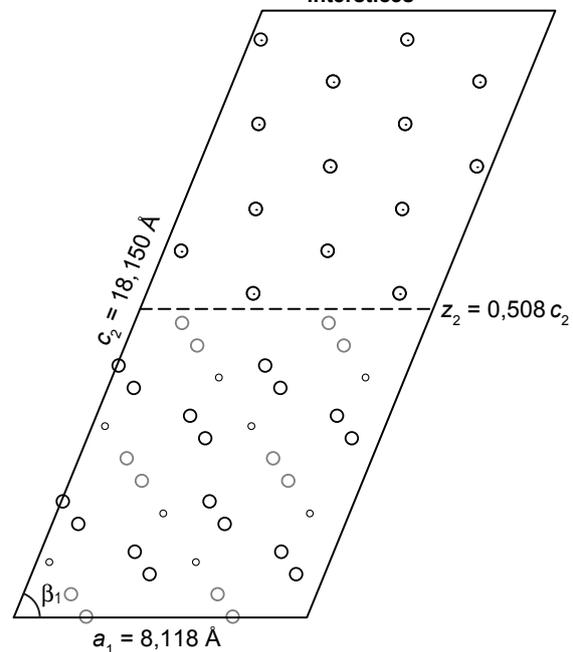


Fig. 3. Supercell containing both cementite and ferrite parts

### Choice of *ab initio* modelling parameters

The above described supercell was used as initial structure for *ab initio* computer modelling. All calculations were performed by WIEN2k code [21] implementing linearized augmented plane wave (LAPW) method. Generalized gradient approximation (GGA) was chosen for calculations.

Supercells with monoclinic angles significantly different from  $90^\circ$  ( $\beta_1 = 67,73^\circ$ ) are inconvenient for *ab initio* modelling in the WIEN2k. So the above described supercell was rebuilt by the program: translation periods changed to  $a_3=8,118$ ;  $b_3=5,088$ ;  $c_3=16,842 \text{ \AA}$  with  $\beta_3=94,221^\circ$  and  $\alpha_3=\gamma_3=90^\circ$ .

Then optimal modelling parameters were defined. In the LAPW method the unit cell is divided into non-overlapping atomic spheres (muffin-tin spheres) having radius  $R_{mt}$ , and the interstitial region. It is assumed that wave functions within muffin-tin spheres are combinations of spherical harmonics, and the charge density is thus spherically symmetric. Wave functions in the interstitial region are expanded into plane waves with the  $K_{max}$  vector. Its value is one of the principal parameters that affect calculation accuracy because it determines the number of basis functions (matrix size). Another important parameter is the number of  $k$ -points. This value characterizes the discrete mesh used for numerical integration over the Brillouin zone. The higher it is, the more points are taken into account in the integration, the greater the accuracy, and the greater computer costs. The purpose of choosing optimal parameters is to provide high calculation accuracy ( $0,01 \text{ eV} \approx 1 \text{ mRy}$ ) at acceptable consumption of computer resources.

First optimization was performed for the number of  $k$ -points, since this parameter is independent of the others. Calculation parameters were the following:  $R_{\text{mt}}^{\text{Fe}} = 2,0$  a.u. [22];  $R_{\text{mt}}^{\text{C}} = 1,4$  a.u.;  $K_{\text{max}} = 5,0$  [22]; cut-off energy  $E_{\text{cut}} = 7,0$  Ry. As can be seen from fig. 4, when the number of  $k$ -points exceeds 64, the total energy  $E$  changes not greater than by 1 mRy, so 64  $k$ -points may be accepted as the optimal value.

Optimal value of  $R_{\text{mt}}$  for iron atoms is  $R_{\text{mt}}^{\text{Fe}} = 2,0$  a.u. [22]. Dependence of the system energy calculated using previously optimized parameters on  $R_{\text{mt}}^{\text{C}}$  is shown in fig. 5. As can be seen, at  $R_{\text{mt}}^{\text{C}} > 1,45$  a.u. the total energy changes by less than 0,5 mRy, so the value  $R_{\text{mt}}^{\text{C}} = 1,45$  a.u. was taken as optimal. Parameter  $R_{\text{mt}} K_{\text{max}}$  controlling convergence is then equal to 7,25.

Thus, the optimal parameters are following: number of  $k$ -points  $N_k = 64$ ; parameter controlling the convergence  $R_{\text{mt}} K_{\text{max}} = 7,25$ ; radii of atomic spheres  $R_{\text{mt}}^{\text{Fe}} = 2,0$  a.u. and  $R_{\text{mt}}^{\text{C}} = 1,45$  a.u.

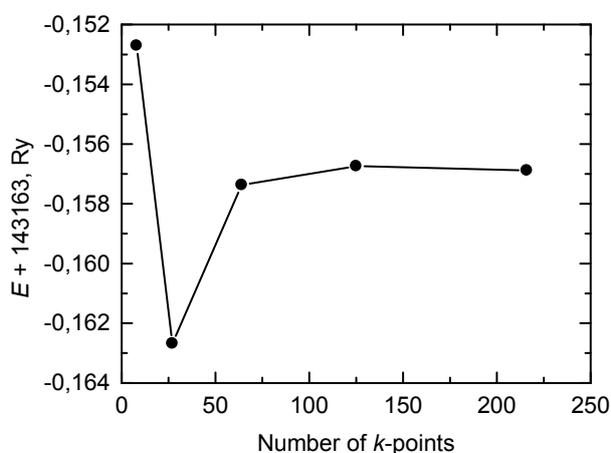


Fig. 4. Dependence of the total energy of the system on the number of  $k$ -points

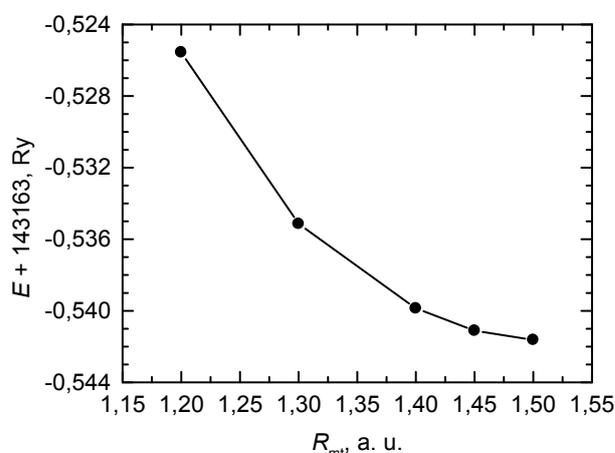


Fig. 5. Dependence of the total energy of the system on the muffin-tin sphere radius of carbon

## Résumé

The supercell for *ab initio* modelling of the ferrite/cementite interface with Bagaryatskii orientation relationship and  $(101)_c \parallel (112)_\alpha$  habit plane has been built up and optimal values of parameters necessary for *ab initio* modelling have been determined. After additional volume optimization this supercell can be used for calculation of ferrite/cementite interfacial energy, interaction of the interface with impurities (e.g., hydrogen) and other lattice defects etc.

## References

1. Smirnov M.A., Schastlivtsev V.M., Zhuravlev L.G. *Osnovy termicheskoy obrabotki stali* (Basics of Heat Treatment of Steel). Ekaterinburg, Ural Branch RAS Publ., 1999. 496 p. (in Russ.).
2. Pickering F.B. *Physical Metallurgy and the Design of Steels* (Materials Science Series). Applied Science Publishers Ltd., 1978. 275 p.
3. Shtremel' M.A. *Prochnost' splyavov. Ch. II: Deformatsiya* (Strength of Alloys. Pt. II: Deformation). Moscow, MISiS Publ., 1997. 527 p. (in Russ.).
4. Rakitin M.S., Mirzoev A.A., Mirzayev D.A. *Bulletin of the South Ural State University. Series "Metallurgy"*. 2010. no. 13(189). Issue 14. pp. 67–71.
5. Gel'd P.V., Ryabov R.A. *Vodorod v metallakh i splyavakh* (Hydrogen in Metals and Alloys). Moscow, Metallurgiya Publ., 1974. 272 p. (in Russ.).
6. Hirth J.P. Effects of Hydrogen on the Properties of Iron and Steel. *Metallurgical Transactions*. 1980. Vol. 11A, no. 6. pp. 861–890. DOI: 10.1007/BF02654700.
7. Kolachev B.A. *Vodorodnaya khrupkost' metallov* (Hydrogen Brittleness of Metals). Moscow, Metallurgiya Publ., 1985. 218 p. (in Russ.).

8. Bernstein I.M., Pressouyre G.M. The Role of Traps in the Microstructural Control of Hydrogen Embrittlement of Steels. *Hydrogen Degradation of Ferrous Alloys* (ed. by R.A. Oriani, J.P. Hirth and M. Śmiałowski). Park Ridge, N.J.: Noyes Publications, 1985, pp. 641–685.
9. Takai K., Nozue A. Effect of Isothermal Transformation Temperature and Cold-Drawing on Hydrogen Occlusion Behavior in Eutectoid Steel. *J. Japan Inst. Metals*, 2000. Vol. 64, no. 8. pp. 669–676.
10. Mirzaev D.A., Mirzoev A.A., Okishev K.Yu., Rakitin M.S. Theory of Hydrogen Solubility in Binary Iron Alloys Based on *Ab Initio* Calculation Results. *Molecular Physics*. 2012. Vol. 110, no. 11–12. pp. 1299–1304. DOI: 10.1080/00268976.2011.645895.
11. Ursaeva A.V., Mirzoev A.A., Ruzanova G.E. *Bulletin of the South Ural State University. Series “Metallurgy”*, 2011. Issue 17. no. 36 (253), pp. 51–55. (in Russ.).
12. Mirzaev D.A., Mirzoev A.A., Okishev K.Yu., Verkhovyykh A.V. Hydrogen–Vacancy Interaction in BCC Iron: *Ab Initio* Calculations and Thermodynamics. *Molecular Physics*. 2014. DOI: 10.1080/00268976.2013.861087.
13. Andrews K.W., Dyson D.J., Keown S.R. *Interpretation of Electron Diffraction Patterns*. London, 1968. 188 p.
14. Fasiska E.J., Jeffrey G.A. On the Cementite Structure. *Acta Cryst.* 1965. Vol. 19, pt. 3. pp. 463–471. DOI: 10.1107/S0365110X65003602.
15. Schastlivtsev V.M., Yakovleva I.L., Mirzaev D.A., Okishev K.Yu. On the Possible Positions of Carbon Atoms in the Cementite Lattice. *The Physics of Metals and Metallography*. 2003. Vol. 96, no. 3. pp. 313–320.
16. Andrews K.W. The Structure of Cementite and Its Relation to Ferrite. *Acta Metallurgica*, 1963. Vol. 11, no. 8. pp. 939–946. DOI: 10.1016/0001-6160(63)90063-4.
17. Schastlivtsev V.M., Mirzaev D.A., Yakovleva I.L. *Struktura termicheski obrabotannoy stali* (The Structure of Heat Treated Steel). Moscow, Metallurgiya, 1994. 288 p. (in Russ.).
18. Tushinskiy L.I., Bataev A.A., Tikhomirova L.B. *Struktura perlita i konstruktivnaya prochnost' stali* (Pearlite Structure and the Structural Strength of Steel). Novosibirsk, VO “Nauka” Publ., 1993. 280 p. (in Russ.).
19. Kurdyumov G.V., Utevskiy L.M., Entin R.I. *Prevrashcheniya v zheleze i stali* (Transformations in Iron and Steel). Moscow, Nauka Publ., 1977. 240 p. (in Russ.).
20. Okishev K.Yu., Mirzaev D.A., Verkhovyykh A.V. *Bulletin of the South Ural State University. Series “Metallurgy”*. 2013. Vol. 13, no. 2, pp. 95–102. (in Russ.).
21. Schwarz K., Blaha P. Solid State Calculations Using WIEN2k. *Computational Materials Science*. 2003. Vol. 28, no. 2. pp. 259–273. DOI: 10.1016/S0927-0256(03)00112-5.
22. Ursaeva A.V., Ruzanova G.E., Mirzoev A.A. Vybór optimal'nykh parametrov dlya postroeniya maksimal'no tochnoy modeli OTsK-zheleza (Selection of Optimal Parameters for Formation the Most Accurate Model of Bcc Iron). *Bulletin of the South Ural State University. Series “Mathematics. Mechanics. Physics”*. 2010. No. 9 (185). Issue 2. pp. 97–101. (in Russ.).

Received 3 March 2014

**ПОСТРОЕНИЕ АТОМИСТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ФАЗОВОЙ ГРАНИЦЫ ПЕРЛИТ/ЦЕМЕНТИТ ДЛЯ AB INITIO МОДЕЛИРОВАНИЯ****А.В. Верховых<sup>1</sup>, К.Ю. Окишев<sup>2</sup>, А.А. Мирзоев<sup>3</sup>, Д.А. Мирзаев<sup>4</sup>**

Работа описывает построение атомной структуры поверхности раздела феррита / цементит в системе Fe-C предназначенную для проведения первопринципных расчетов параметров фазовой границы методом суперячейки для железоуглеродистых сплавов. Для согласования соотношений между решетками двух фаз были использованы ориентационные соотношения типа Багарятского, при которых плоскости  $(101)_C$   $(112)_\alpha$  параллельны между собой. Проведена оптимизация параметров первопринципного моделирования для точного воспроизведения параметров решетки феррита с использованием пакета WIEN2k.

*Ключевые слова:* феррит, цементит, поверхность, соотношение Багарятского, неэмпирическое моделирование, суперячейка.

**Литература**

1. Смирнов, М.А. Основы термической обработки стали / М.А. Смирнов, В.М. Счастливцев, Л.Г. Журавлев. – Екатеринбург, УрО РАН, 1999. – 496 с.
2. Pickering, F.B. Physical Metallurgy and the Design of Steels (Materials Science Series) / F.B. Pickering. – Applied Science Publishers Ltd., 1978. – 275 p.
3. Штремель М.А. Прочность сплавов. В 2 ч. Ч. 2: Деформация / М.А. Штремель. – М.: МИ-СиС, 1997. – 527 с.
4. Ракитин, М.С. Изменение электронной структуры альфа-железа, содержащего внедренные атомы водорода / М.С. Ракитин, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Металлургия». – 2010. – Вып. 14. – № 13(189). – С. 67–71.
5. Гельд, П.В. Водород в металлах и сплавах / П.В. Гельд, Р.А. Рябов. – М.: Metallurgia, 1974. – 272 с.
6. Hirth, J.P. Effects of Hydrogen on the Properties of Iron and Steel. Metallurgical Transactions. – 1980. – Vol. 11A, no. 6. – P. 861–890. doi: 10.1007/BF02654700.
7. Колачев, Б.А. Водородная хрупкость металлов / Б.А. Колачев. – М.: Metallurgia, 1985. – 218 с.
8. Bernstein, I.M. The Role of Traps in the Microstructural Control of Hydrogen Embrittlement of Steels. Hydrogen Degradation of Ferrous Alloys / I.M. Bernstein, G.M. Pressouyre. – Park Ridge, N.J.: Noyes Publications, 1985. – P. 641–685.
9. Takai, K. Effect of Isothermal Transformation Temperature and Cold-Drawing on Hydrogen Occlusion Behavior in Eutectoid Steel / K. Takai, A. Nozue. – J. Japan Inst. Metals. – 2000. – Vol. 64, no. 8. – P. 669–676.
10. Theory of Hydrogen Solubility in Binary Iron Alloys Based on Ab Initio Calculation Results / D.A. Mirzaev, A.A. Mirzoev, K.Yu. Okishev, M.S. Rakitin. Molecular Physics. 2012. Vol. 110, no. 11–12. – P. 1299–1304. doi: 10.1080/00268976.2011.645895.
11. Урсаева, А.В. Ab initio моделирование комплексов водород-вакансия (VHn) в ОЦК-железе / А.В. Урсаева, А.А. Мирзоев, Г.Е. Рузанова // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Металлургия». – 2011. – Вып. 17. – № 36 (253). – С. 51–55.

<sup>1</sup> Верховых Анастасия Владимировна – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: ursaeva@physics.susu.ac.ru

<sup>2</sup> Окишев Константин Юрьевич – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра физического металловедения и физики твердого тела, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: okishev@physmet.susu.ac.ru

<sup>3</sup> Мирзоев Александр Аминулаевич – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: mirzoev@physics.susu.ac.ru

<sup>4</sup> Мирзаев Джалал Аминулович – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра физического металловедения и физики твердого тела, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: mirzayev@physmet.susu.ac.ru

12. Hydrogen–Vacancy Interaction in bcc Iron: Ab Initio Calculations and Thermodynamics / D.A. Mirzaev, A.A. Mirzoev, K.Yu. Okishev, A.V. Verkhovykh // *Molecular Physics: сб. науч. тр.*, 2014. doi: 10.1080/00268976.2013.861087.
13. Andrews, K.W. Interpretation of Electron Diffraction Patterns / K.W. Andrews, D.J. Dyson, S.R. Keown. London, 1968. – 188 p.
14. Fasiska, E.J. On the Cementite Structure / E.J. Fasiska, G.A. Jeffrey // *Acta Cryst.* – 1965. – Vol. 19, pt. 3. – P. 463–471. doi: 10.1107/S0365110X65003602.
15. On the Possible Positions of Carbon Atoms in the Cementite Lattice / V.M. Schastlivtsev, I.L. Yakovleva, D.A. Mirzaev, K.Yu. Okishev // *The Physics of Metals and Metallography.* – 2003. – Vol. 96, no. 3. – P. 313–320.
16. Andrews, K.W. The Structure of Cementite and Its Relation to Ferrite / K.W. Andrews. – *Acta Metallurgica.* – 1963. – Vol. 11, no. 8. – P. 939–946. doi: 10.1016/0001-6160(63)90063-4.
17. Счастливцев, В.М. Структура термически обработанной стали / В.М. Счастливцев, Д.А. Мирзаев, И.Л. Яковлева. – М.: Металлургия, 1994. – 288 с.
18. Турчинский, Л.И. Структура перлита и конструктивная прочность стали / Л.И. Турчинский, А.А. Батаев, Л.Б. Тихомирова. – Новосибирск, ВО «Наука», 1993. – 280 с.
19. Курдюмов, Г.В. Превращения в железе и стали / Г.В. Курдюмов, Л.М. Утевский, Р.И. Энтин. – М.: Наука, 1977. – 240 с.
20. Окишев, К.Ю. Возможность захвата водорода на границе феррит/цементит в сталях / К.Ю. Окишев, Д.А. Мирзаев, А.В. Верховых // *Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Металлургия».* – 2013. – Т. 13, № 2. – С. 95–102.
21. Schwarz, K. Solid State Calculations Using WIEN2k / K. Schwarz, P. Blaha // *Computational Materials Science.* – 2003. – Vol. 28, no. 2. – P. 259–273. doi: 10.1016/S0927-0256(03)00112-5.
22. Урсаева, А.В. Выбор оптимальных параметров для построения максимально точной модели ОЦК-железа / А.В. Урсаева, Г.Е. Рузанова, А.А. Мирзоев // *Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика».* – 2010. – Вып. 2. – № 9 (185). – С. 97–101.

*Поступила в редакцию 3 марта 2014 г.*

# ВЛИЯНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ НА МАГНИТНУЮ АКТИВНОСТЬ ПРОДУКТОВ ХИМИЧЕСКОЙ КАРБОНИЗАЦИИ ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА<sup>1</sup>

*В.Е. Живулин<sup>2</sup>, Л.А. Песин<sup>3</sup>, В.М. Морилова<sup>4</sup>, О.В. Корякова<sup>5</sup>*

**Представлены результаты изучения влияния термической обработки на продукты химической карбонизации поливинилиденфторида методом ЭПР спектроскопии. Впервые обнаружено скачкообразное увеличение концентрации парамагнитных центров при термической обработке выше 250 С, сопровождаемое изменением параметров сигнала ЭПР. При хранении синтезированных образцов в течение трех месяцев происходит частичное снижение их магнитной активности.**

*Ключевые слова: ЭПР, ПВХДФ, химическая карбонизация, термическая обработка.*

## Введение

В последние годы большое количество работ посвящено синтезу и изучению новых материалов на основе углерода (графены, углеродные нанотрубки, фуллерены). Интерес к новым углеродным материалам обусловлен их уникальными физическими и химическими свойствами, перспективными для использования в научных и технических целях.

В этой связи представляет интерес гипотеза о возможности существования одномерной модификации химически чистого углерода – карбина [1]. Идеальный карбин предполагается состоящим из линейных углеродных цепей, в которых соседние атомы соединены между собой либо двойными, либо чередованием тройных и одинарных связей. Цепи должны быть упакованы в кристаллы за счет ван-дер-ваальсовских сил. Однако до настоящего времени чистых кристаллов карбина синтезировать не удалось. Продукты синтеза называют карбиноидами, так как они имеют огромное количество дефектов (неуглеродные включения, межцепочечные сшивки и т.д.). Тем не менее, наноразмерные фрагменты линейно полимеризованного углерода в них присутствуют [2].

Одним из направлений синтеза таких углеродных наноструктур является карбонизация полимеров, цепи которых имеют углеродный скелет, например, поливинилиденфторида (ПВДФ). Существуют два основных способа его карбонизации – радиационный (облучение квантами и бомбардировка микрочастицами различных энергий) [3] и химический [2, 4–9]. Равное количество атомов фтора и водорода в его цепях позволяет произвести глубокое дегидрофторирование (ДФ) за счет их удаления в виде молекул фтористого водорода [10].

Ранее в работах [4–9] изучены процессы, происходящие при химической карбонизации ПВДФ. В [9] на основе анализа ИК-спектров частично химически карбонизованных образцов проведена оценка глубины проникновения дегидрофторизирующей смеси (около 4 мкм).

В работе [7] рассматриваются вариации ЭПР-поглощения продуктов химической карбонизации ПВДФ в зависимости от продолжительности карбонизации и последующего хранения. Согласно этим данным, сигнал ЭПР представляет одиночную линию с g-фактором, близким к таковому свободного электрона. Сигнал тем интенсивнее, чем продолжительнее синтез образца. При хранении образцов форма спектров не меняется, однако происходит уменьшение интегральной

<sup>1</sup> Работа выполнена при финансовой поддержке гранта ФГБОУ ВПО «ЧГПУ» 2013 г., проект № УГ–158/13/А.

<sup>2</sup> Живулин Владимир Евгеньевич – аспирант, кафедра физики и методики обучения физике, Челябинский государственный педагогический университет.

<sup>3</sup> Песин Леонид Абрамович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра физики и методики обучения физике, Челябинский государственный педагогический университет.

E-mail: pesinla@mail.ru

<sup>4</sup> Морилова Виктория Михайловна – аспирант, кафедра физики и методики обучения физике, Челябинский государственный педагогический университет.

<sup>5</sup> Корякова Ольга Васильевна – кандидат химических наук, лаборатория органических материалов, Институт органического синтеза УрО РАН, г. Екатеринбург.

интенсивности сигнала, причём с течением времени скорость спада уменьшается. Для образцов с большей продолжительностью синтеза этот процесс протекает быстрее.

Работа [8] посвящена изучению кинетики изменения ЭПР-поглощения продуктов химического ДГФ ПВДФ в течение 1, 3 и 12 часов при последующем долговременном хранении в атмосфере воздуха и при пониженном давлении. Интенсивность сигнала почти всех образцов уменьшается с течением времени. Исключение составляет образец с максимальной продолжительностью обработки, хранившийся в вакууме. Парамагнетизм этого образца уменьшался в течение первых двух дней (~3200 мин) и возрастал при дальнейшем хранении, причём рост несколько превосходил предыдущий спад.

В данной работе впервые представлены экспериментальные результаты по изучению влияния термической обработки и последующего хранения на продукты химической карбонизации пленок ПВДФ. Термообработка проводилась в интервале температур 150–300 °С, то есть ниже и выше температуры плавления полимера (170 °С). Методом ЭПР спектроскопии установлено, что при повышении температуры отжига исключительно резко возрастает количество парамагнитных центров. Подтверждены данные работ [7, 8], свидетельствующие, что исходный полимер сигнала ЭПР не дает.

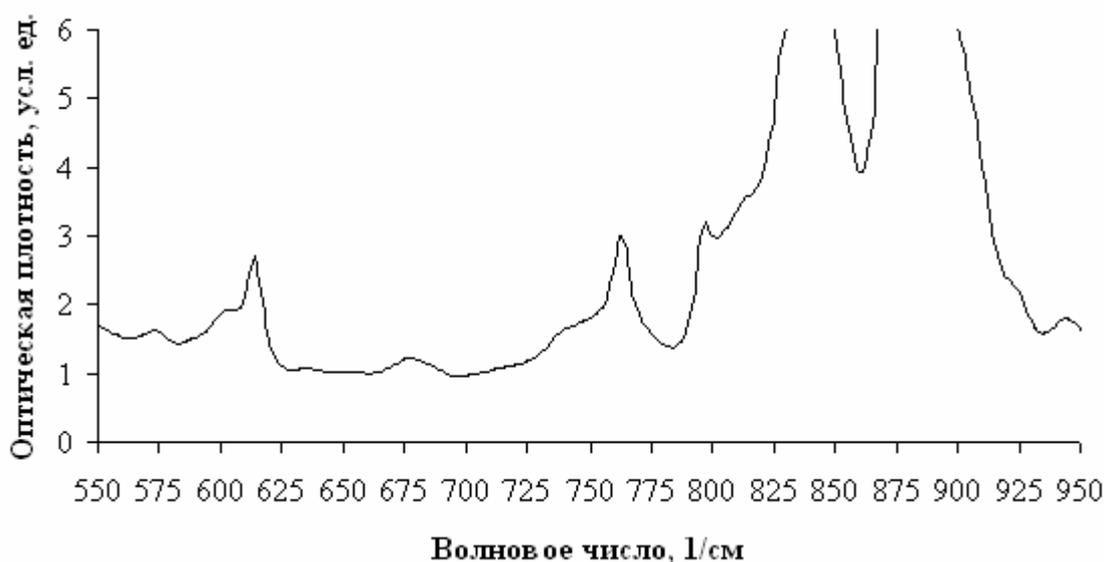


Рис. 1. Фрагмент ИК спектра поливинилиденфторида марки Ф2мэ

#### Методика приготовления образцов.

Для исследования была выбрана пленка поливинилиденфторида (ПВДФ) марки Ф2мэ исходной толщиной 60 мкм, предоставленная ОАО «Пластполимер» г. Санкт-Петербург. Данные ИК спектроскопии позволяют судить о степени кристалличности и конформационном составе полимера (рис. 1). Методика оценки кристалличности и фазового состава описана в работах [11, 12]. Пленка марки Ф2мэ оказалась частично кристаллической, доля кристаллической фазы составляет 0,51. В материале доминирует  $\beta$ -конформация (74 %).

Приготовлено 5 образцов размерами 20×20 мм. Перед ДГФ все образцы в течение 30 мин промывались в ультразвуковой ванне попеременно в ацетоне и дистиллированной воде. Далее образцы одновременно помещались в дегидрофторирующую смесь (ДГФС) и находились в ней в течение 3 ч. Объем смеси составлял 200 мл. ДГФС была приготовлена по методике, описанной в работе [4], и состояла из насыщенного раствора КОН в этаноле и ацетона в объемном соотношении 1:9. После дегидрофторирования все образцы снова в течение 30 мин промывались в ультразвуковой ванне сначала в ацетоне, а затем в дистиллированной воде.

Термическая обработка проводилась в трубчатой печи, оборудованной блоком высокоточной регулировки температуры. Четыре образца были одновременно помещены в печь. Нагрев производился ступенчато со 150 до 300 °С с шагом 50 °С и изотермической выдержкой в течение 40 мин на каждой ступени. После каждой очередной изотермической выдержки один из образцов

вынимался из печи и остужался на воздухе до комнатной температуры. В результате получены образцы 1–5 частично карбонизованных продуктов ПВДФ с идентичной химической обработкой, но различной максимальной температурой термического воздействия, соответственно, 0, 150, 200, 250 и 300 °С.

Приготовленные образцы были исследованы методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР). Спектры сигнала ЭПР регистрировались радиоспектрометром РЭ–1306 при комнатной температуре. Для определения погрешности измерений параметров линии поглощения при одинаковых настройках прибора производилось многократная (41 раз) запись сигнала ЭПР от одного и того же синтезированного значительно ранее образца, подвергнувшегося последовательно химической обработке в течение 3 ч и отжигу при 250 °С в течение 40 мин. Случайная погрешность вычислялась по стандартному алгоритму и составила для  $g$ -фактора и ширины линии, соответственно, 0,0013 и 0,04 мТл. Интегральная интенсивность находилась методом двойного интегрирования и нормировалась на массу образца. Относительная погрешность измерения интегральной интенсивности составила 19 %. В качестве эталона использовался образец с  $\text{MgO:Mn}^{2+}$  (сертификат калибровки № 04/910-2012). Масса образцов измерялась на аналитических весах ВЛР–20. Спектры рентгеновской дифракции регистрировались при помощи прибора ДРОН-3 с кобальтовой трубой в качестве источника излучения.

### Результаты и их обсуждение

После ДГФ пленка приобретает темно-коричневый цвет, оставаясь при этом эластичной. С увеличением температуры термообработки образцы становятся хрупкими, приобретая матовый оттенок. Исходная пленка ПВДФ сигнала ЭПР не дает. Дополнительно проведенный эксперимент показал, что при её нагревании до 250 °С образования парамагнитных центров не происходит. Следовательно, регистрируемый сигнал относится только к веществу карбонизованного слоя. Сигнал представляет собой одиночную симметричную линию с  $g$ -фактором, близким к таковому свободного электрона.

При нагреве образцов до температур 150 и 200 °С интенсивность сигнала уменьшается по сравнению с образцом, который не нагревался, при этом ширина линии поглощения уменьшается (рис. 2). Дальнейшее повышение температуры до 250 и 300 °С приводит к резкому увеличению интенсивности сигнала. Линия поглощения сначала продолжает сужаться, но при 300 °С несколько уширяется. Для образцов, обработанных при 250 и 300 °С, наблюдается уменьшение величины  $g$ -фактора. Основные характеристики ЭПР спектров образцов 1–5 представлены в таблице.

Параметры спектров ЭПР карбонизованных образцов через 2 дня после синтеза и спустя 3 месяца хранения (соответственно индексы 1 и 2)

№	$T_{\text{обр.}}$ (°С)	$\Delta H_1$ , мТл	$\Delta H_2$ , мТл	$g_1$ -фактор	$g_2$ -фактор	Концентрация ПМЦ, спин/грамм (1)	Концентрация ПМЦ, спин/грамм (2)
1	0	1,63	0,91	2,0044	2,0044	$2,55 \cdot 10^{18}$	$0,06 \cdot 10^{18}$
2	150	1,00	1,07	2,0044	2,0036	$0,86 \cdot 10^{18}$	$0,09 \cdot 10^{18}$
3	200	0,75	0,90	2,0045	2,0035	$0,89 \cdot 10^{18}$	$0,17 \cdot 10^{18}$
4	250	0,56	0,57	2,0030	2,0003	$11,16 \cdot 10^{18}$	$1,20 \cdot 10^{18}$
5	300	0,61	0,59	2,0024	2,0023	$74,89 \cdot 10^{18}$	$6,70 \cdot 10^{18}$

Интегральная интенсивность сигнала ЭПР пропорциональна концентрации парамагнитных центров (ПМЦ). Для нахождения интегральных интенсивностей спектры подвергались двойному интегрированию. Сравнение полученных значений для образцов и эталона позволяет измерить концентрации ПМЦ с учётом массы навески и настроек прибора.

При росте температуры до 150 °С происходит небольшое уменьшение количества ПМЦ, и оно остается практически неизменным при нагревании до 200 °С. При дальнейшем повышении температуры до 250 и 300 °С градусов происходит резкое скачкообразное увеличение концентрации ПМЦ (см. таблицу). Уменьшение концентрации ПМЦ при температурах до 200 °С, скорее всего, связано с окислением и разрушением радикалов. Изменение ширины сигнала, увеличение концентрации ПМЦ и изменение  $g$ -фактора характеризует изменение структуры карбонизованного слоя.

Образцы в течение трех месяцев хранились в темноте в атмосфере воздуха. При хранении у всех образцов наблюдается изменение параметров ЭПР спектров, причём наиболее значительно - уменьшение концентрации ПМЦ (см. таблицу).

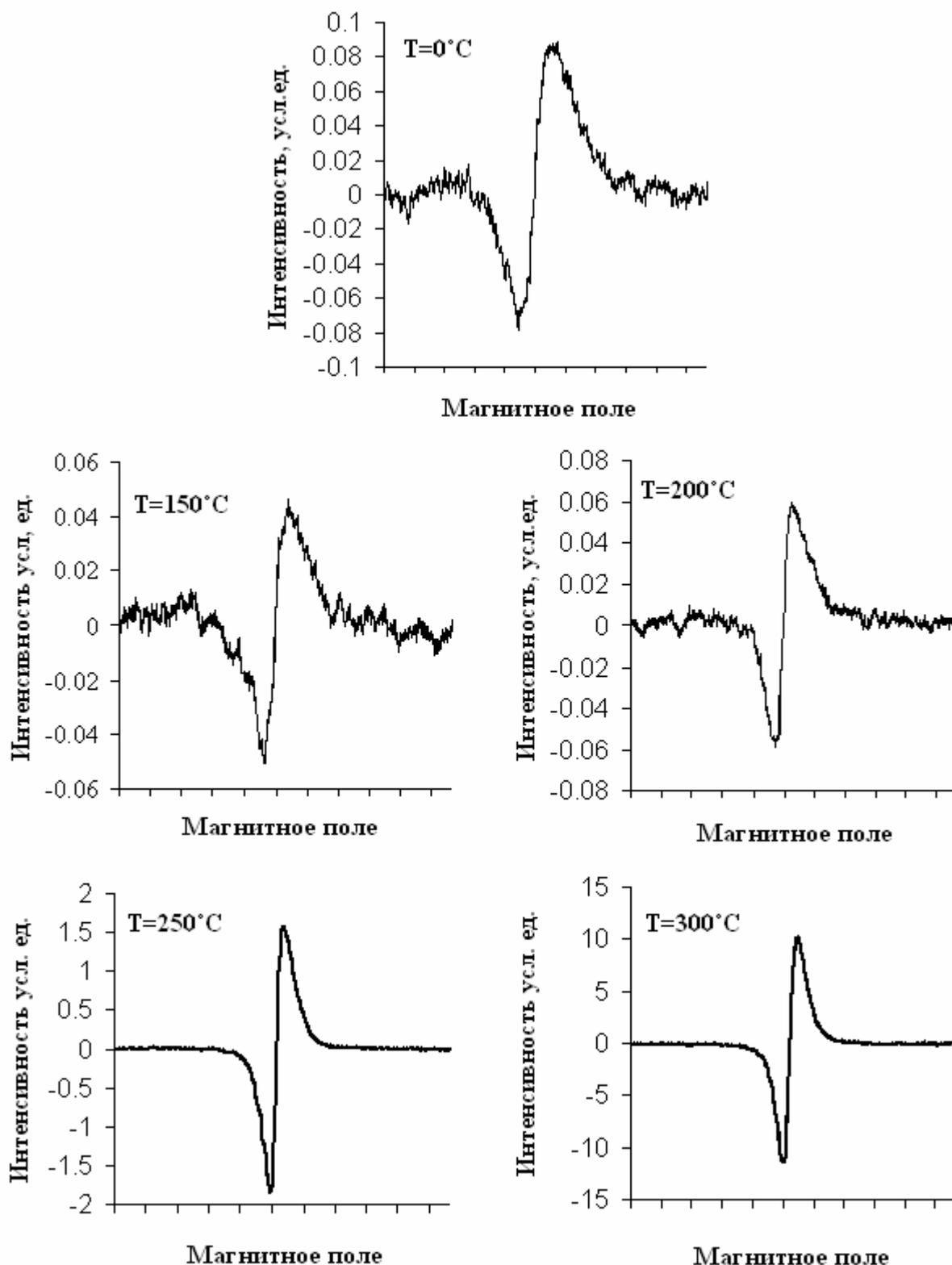


Рис. 2. Изменение формы сигнала ЭПР при термической обработке. Одно деление шкалы магнитного поля соответствует 1,5 мТл

Метод рентгеновской дифрактометрии обнаруживает ещё один интригующий эффект: дифрактограмма образца, отожженного при 200 °С, имеет ряд узких рефлексов в широком интервале углов (рис. 3). Этот эффект требует дальнейшего детального изучения. Дифрактограмма исходной пленки ПВДФ имеет несколько широких максимумов в интервале углов  $2\theta$  15°–25°. При химическом дегидрофторировании интенсивность данных максимумов уменьшается, что свидетельствует о разрушении исходной структуры в поверхностном слое полимера, прореагировавшего с ДГФ смесью.

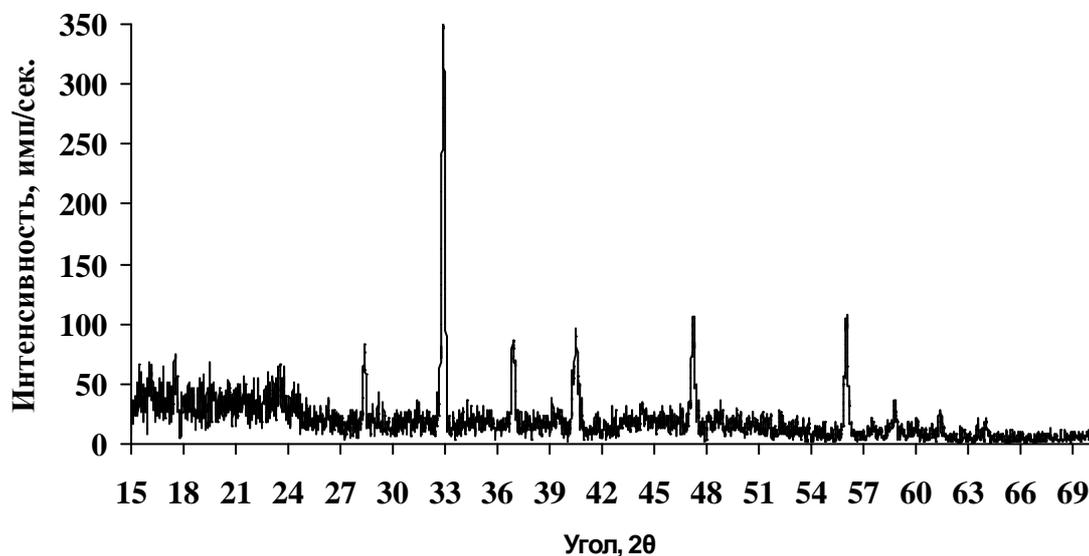


Рис. 3. Дифрактограмма химически карбонизованной пленки ПВДФ, подвергавшейся изотермическому отжигу при  $T = 200$  °С в течение 40 мин

### Заключение и выводы

Первичное химическое дегидрофторирование ПВДФ приводит к формированию парамагнитных центров, которые частично разрушаются при хранении. Скорее всего, это связано с разрушением радикалов, находящихся в поверхностном слое, при взаимодействии с воздушной средой. При последующей термической обработке до 200 °С концентрация парамагнитных центров уменьшается, как и скорость их убыли при хранении. Дальнейшее термическое воздействие на продукт химической карбонизации ПВДФ до температур 250 °С и выше вызывает скачкообразное увеличение концентрации парамагнитных центров. Таким образом, на поверхности плёнок ПВДФ путём последовательной комбинации химического и термического воздействий удалось синтезировать новое вещество, обладающее высокой магнитной активностью. Природа парамагнитных центров, факторы, приводящие к их нестабильности, причины появления узких дифракционных пиков требуют дальнейших исследований с привлечением различных физико-химических методов.

### Благодарности

Выражаем благодарность доценту кафедры радиофизики и электроники Челябинского государственного университета Александру Алексеевичу Федию за неоценимую помощь в ремонте и настройке радиоспектрометра РЭ–1306.

### Литература

1. Carbyne and carbynoid structures / под ред. R.V. Heimann, S.E. Evsyukov, L. Kavan. – Kluwer Academic Publishers, Dordrecht. – 1999. – 446 p.
2. Маргамов, И.Г. Инфракрасные спектры карбиноидных пленок, получаемых химическим путем / И.Г. Маргамов, С.Е. Евсюков, Л.А. Песин, Е.М. Байтингер, П.С. Семочкин, И.В. Грибов, Н.А. Москвина, В.Л. Кузнецов // Журнал прикладной химии. – 2003. – № 1(76). – С. 128–132.

3. Le Moël, A. Modifications of poly(vinylidene fluoride) (PVDF) under high energy heavy ion, X-ray and electron irradiation studied by X-ray photoelectron spectroscopy / A. Le Moël, J.P. Duraud, E. Balanzat // Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. – 1986. – № 1(18). – P. 59–63.

4. Кудрявцев, Ю.П. Эффективная дегидрофторирующая система для поливинилиденфторида / Ю.П. Кудрявцев, С.Е. Евсюков, В.Г. Бабаев // Изв. АН СССР. Сер. Хим. – 1992. – № 5. – С. 1223–1225.

5. Chemical dehydrochlorination of polytrichlorobutadienes. A new route to carbines / I.I. Vointseva, L.M. Gil'man, Yu.P. Kudryavtsev *et al.* // Europ. Polymer J. – № 1(32). – P. 61–68.

6. Евсюков, С.Е. Химическое дегидрогалогенирование галогеносодержащих полимеров / С.Е. Евсюков, Ю.П. Кудрявцев, Ю.В. Коршак // Успехи химии. – 1991. – № 4(60). – С. 764–798.

7. Оптические свойства и ЭПР-поглощение химически дегидрофторированного поливинилиденфторида / Н.А. Мавринская, Л.А. Песин, М. Баумгартен и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2008. – Вып. 10. – №7(107). – С. 80–88.

8. Влияние условий и продолжительности хранения на интенсивность сигнала ЭПР химически дегидрофторированных производных поливинилиденфторида / Н.А. Мавринская, А.В. Мавринский, М. Баумгартен // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2008. – Вып. 11. – № 22(122). – С. 88–91.

9. Оценка глубины и скорости проникновения дегидрофторирующей смеси в поливинилиденфторид методом ИК-спектроскопии / А.А. Волегов, Л.А. Песин, И.Г. Маргамов и др. // Известия Челябинского научного центра. – 2006. – № 4(34). – С. 26–31.

10. Кочервинский, В.В. Структура и свойства блочного поливинилиденфторида и систем на его основе / В.В. Кочервинский // Успехи химии. – 1996. – № 10(65). – С. 936–987.

11. Влияние одноосного растяжения пленок поливинилиденфторида на форму и положение СН-пииков в ИК-спектрах / В.М. Морилова, О.В. Корякова, С.Е. Евсюков, Л.А. Песин // Вестник Челябинского государственного университета. Физика. – 2011. – № 7(222). – С. 35–39.

12.  $\alpha$ -to- $\beta$  Transformation on PVDF Films Obtained by Uniaxial Stretch / V. Sencadas, V.M. Moreira, S. Lanceros-Mendéz *et al.* // Materials Science Forum. – 2006. – № 514/516. – P. 872–876.

*Поступила в редакцию 17 сентября 2013 г.*

---

**Bulletin of the South Ural State University  
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"  
2014, vol. 6, no. 2, pp. 56–62**

---

## **HEAT TREATMENT INFLUENCE ON MAGNETIC ACTIVITY OF CHEMICAL POLYVINYLIDENFLUORIDE CARBONIFICATION PRODUCTS**

**V.E. Zhivulin<sup>1</sup>, L.A. Pesin<sup>2</sup>, V.M. Morilova<sup>3</sup>, O.V. Koryakova<sup>4</sup>**

The results of heat treatment influence on chemical polyvinylidenfluoride carbonification products are given with the help of electron paramagnetic resonance spectroscopy method. For the first time step-like increase of paramagnetic centers concentration has been observed at heat treatment at over 250 °C which is accompanied by the changes in parameters of electron paramagnetic resonance signals. At conservation of synthesized samples there is partial decrease of magnetic activity within three months.

*Keywords: electron paramagnetic resonance, polyvinylidenfluoride, chemical carbonification, heat treatment.*

---

<sup>1</sup> Zhivulin Vladimir Evgen'evich, a Post-Graduate Student, Physics and teaching methods in physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

<sup>2</sup> Pesin Leonid Abramovich, Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Physics and teaching methods in physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

E-mail: pesin@cspu.ru

<sup>3</sup> Morilova Viktoriya Mikhailovna, a Post-Graduate Student, Physics and teaching methods in physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

<sup>4</sup> Koryakova Olga Vasil'evna, Cand. Sc. (Chemistry), Organic Material Laboratory, Institute of Organic Synthesis of the Urals branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg.

References

1. Heimann R.B. (Ed.), Evsyukov S.E. (Ed.), Kavan L. (Ed.) *Carbyne and carbynoid structures*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1999. 444 p.
2. Margamov I.G., Evsyukov S.E., Pesin L.A., Baitinger E.M., Semochkin P.S., Gribov I.V., Moskvina N.A., Kuznetsov V.L. IR spectra of carbynoid films prepared by dehydrofluorination of poly(vinylidene fluoride). *Russian Journal of Applied Chemistry*. 2003. no. 1(76). pp. 124–127.
3. Le Moël A., Duraud J.P., Balanzat E. Modifications of poly(vinylidene fluoride) (PVDF) under high energy heavy ion, X-ray and electron irradiation studied by X-ray photoelectron spectroscopy. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res.* 1986. no. 1(18). pp. 59–63.
4. Kudryavtsev Yu.P., Evsyukov S.E., Babaev V.G. An efficient dehydrofluorinating system for poly(vinylidene fluoride). *Reports of the Russian Academy of Sciences. Chemistry series*. 1992. no. 5. pp. 1223–1225.
5. Vointseva I.I., Gil'man L.M., Kudryavtsev Yu.P., Evsyukov S.E., Pesin L.A., Gribov I.V., Moskvina N.A., Khvostov V.V. Chemical dehydrochlorination of polytrichlorobutadienes. A new route to carbines. *Europ. Polymer Journal*. 1996. no. 1(32). pp. 61–68.
6. Evsyukov S.E., Kudryavtsev Yu.P., Korshak Yu.V. Chemical dehydrohalogenation of halogen-containing polymers. *Russ Chem Rev*. 1991. no. 4(60). pp. 764–798.
7. Mavrinskaya N.A., Pesin L.A., Baumgarten M., Baitinger E.M., Mavrinsky A.V., Evsyukov S.E. Opticheskie svoystva i EPR-pogloshchenie khimicheski degidrotorirovannogo polivinili-denftorida (Optical properties and ESR absorption of chemically dehydrofluorinated poly(vinylidene fluoride)) // *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika, fizika, khimiya»*. 2008. Issue 10. no. 7(107). pp. 80–88. (in Russ.).
8. Mavrinskaya N.A., Mavrinsky A.V., Baumgarten M., Baitinger E.M., Evsyukov S.E., Pesin L.A. Vliyanie usloviy i prodolzhitel'nosti khraneniya na intensivnost' signala EPR khimicheski degidrotorirovannykh proizvodnykh polivinilidenftorida (Influence of the conditions and period of storage on the electron paramagnetic resonance signal strength of the chemically dehydrofluorinated derivants of the polyvinylidene fluoride). *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika, fizika, khimiya»*. 2008. Issue 11. no. 22(122). pp. 88–91. (in Russ.).
9. Volegov A.A., Pesin L.A., Margamov I.G., Evsyukov S.E., Koryakova O.V., Kochedykov V.A. *Reports of the Chelyabinsk Scientific Center*. 2006. no. 4(34). pp. 26–31. (in Russ.).
10. Kochervinskii V.V. The structure and properties of block poly(vinylidene fluoride) and systems based on it. *Russ Chem Rev*. 1996. № 10(65). pp. 865–913. (in Russ.).
11. Morilova V.M., Koryakova O.V., Evsyukov S.E., Pesin L.A. Vliyanie odnoosnogo rastyazheniya plenok polivinilidenftorida na formu i polozhenie CH-pikov v IK-spektrakh (An effect of uniaxial stretching of poly(vinylidene fluoride) films on the width and frequency position of CH-peaks in IR-spectra). *Vestnik Chelyabinskogo gosudarstvennogo universiteta. Fizika*. 2011. no. 7(222). pp. 35–39. (in Russ.).
12. Sencadas V., Moreira V.M., Lanceros-Mendéz S., Pouzada A.S., Gregório R. Jr.  $\alpha$ -to- $\beta$  Transformation on PVDF Films Obtained by Uniaxial Stretch. *Materials Science Forum*. 2006. no. 514/516. pp. 872–876.

Received 17 September 2013

# ЭНДОЭДРАЛЬНЫЕ КОМПЛЕКСЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК С ЛИТИЕМ ПРИ КОНЕЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

С.А. Созыкин<sup>1</sup>, В.П. Бескачко<sup>2</sup>

Методами первопринципной молекулярной динамики моделируются строение и динамические свойства углеродных нанотрубок, содержащих в полости атомы лития, в диапазоне температур 100–700 К. Показано, что основные закономерности в строении таких комплексов, выявленные ранее при  $T = 0$  К, сохраняются также и при всех рассмотренных температурах. Изучен характер движения внедренных атомов в зависимости от их концентрации и температуры. Предсказывается, что при малых концентрациях движение атомов лития становится инфинитным при температурах, превышающих комнатные. В отличие от этого случая, при концентрациях, превышающих порог кластерообразования, движение кластеров лития инфинитно даже при самых низких из рассмотренных температур.

*Ключевые слова:* углеродные нанотрубки, эндоэдральный комплекс, атомная структура и динамика, компьютерное моделирование, молекулярная динамика, расчеты из первых принципов.

## Введение

Эндоэдральным комплексом углеродной нанотрубки (УНТ) называется УНТ, содержащая в своей полости инородные атомные структуры. Такие комплексы принято обозначать как  $X@(n,m)$ , где  $X$  – символ, указывающий на внедренное вещество, а  $n$  и  $m$  – индексы хиральности трубки. С теоретической точки зрения такие объекты интересны тем, что имеют микроскопические размеры в двух измерениях и мезо- или даже макроскопические – в оставшемся измерении. Присутствие микроскопических измерений означает, что строение и свойства объекта должны описываться квантовомеханически, и поэтому результат взаимодействия УНТ с окружением нельзя предсказать так же просто, как для макроскопических тел. На данном этапе исследований, когда информации о свойствах комплексов еще недостаточно для ее полуэмпирического или феноменологического обобщения, целесообразным является использование априорных методов расчета, таких как метод функционала электронной плотности или *ab initio* молекулярной динамики.

Одними из самых простых и изученных теоретически являются комплексы с литием,  $Li@(n,m)$ , по причине, видимо, их перспективности для разработки нового поколения электрических батарей. В работе [1] рассмотрен комплекс  $Li@(12,0)$ , а в [2] –  $Li@(5,5)$ . Нами было изучено строение, электрические и механические свойства комплексов  $Li@(7,7)$  и  $Li@(11,0)$  [3–5]. Все эти исследования относятся к случаю низких температур,  $T \sim 0$  К, в то время как реальные устройства обычно работают при температурах  $T \sim 300$  К и выше. В настоящее время неясно, сохраняются ли выводы, сделанные в работах [1–5], при конечных, интересных для практики температурах. В настоящей работе делается попытка ответить на этот вопрос с помощью компьютерного моделирования обсуждаемых комплексов, исходя из первых физических принципов.

## Модели комплексов

Во всех расчетах использовалась молекулярная динамика Кара–Паринелло, реализованная в пакете SIESTA [6]. Для обменно-корреляционного взаимодействия в приближении локальной плотности применялась параметризация Каперлея и Алдера. В модели  $2s^2 2p^2$  электроны углерода и  $2s^1$  электрон лития рассматривались точно, а остальные описывались псевдопотенциалом Трулиера–Мартинса. Для валентных электронов использовался базис DZP (для С: две радиальные функции для  $2s$  и  $2p$ , и одна  $3d$  орбиталь; для Li: две радиальные функции для  $2s$  и одна  $2p$  орбиталь). Количество базисных функций, таким образом, составляло 13 для атома углерода и 3 для атома лития. В расчетах использовался термостат Нозе–Хувера.

<sup>1</sup> Созыкин Сергей Анатольевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет. E-mail: sergey.sozykin@gmail.com

<sup>2</sup> Бескачко Валерий Петрович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

Использованный нами метод, как и все априорные методы, является весьма ресурсоемким в вычислительном плане, что существенно ограничивает как размер моделируемой системы, так и длину описываемой ею фазовой траектории. Так, при тех ресурсах, что предоставляются вычислительным кластером ЮУрГУ «Торнадо», возможно рассмотрение систем, состоящих из ~100 атомов углерода. Поэтому в качестве объекта исследования был выбран фрагмент комплекса  $Li@(7,7)$  длиной  $\approx 1$  нм, содержащий 112 атомов углерода и от 1 до 4 атомов лития (рис. 1). Эта модель изучалась в диапазоне температур 100–700 К. Использовались периодические граничные условия. Размер расчетной ячейки вдоль оси нанотрубки устанавливался в 10 раз меньше, чем размеры в двух оставшихся измерениях. Это позволяет считать, что моделируются макроскопически длинные комплексы, не взаимодействующие друг с другом.

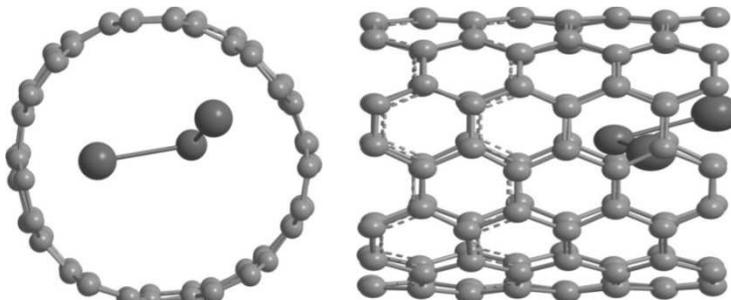


Рис.1. Модель фрагмента УНТ (7,7) с 3 атомами лития

### Методика численных экспериментов

Указанный набор методов неоднократно успешно использовался нами [3–5] и другими исследователями при моделировании УНТ. Получаемые результаты, хотя и согласуются друг с другом, однако часто не вполне совпадают количественно. Ввиду сложности и громоздкости расчетов установить причины расхождений не просто. Всегда хочется иметь оценку потенциальной точности метода, той точности, которой можно достичь в расчетах более простых систем. С этой целью мы в настоящей работе рассмотрели две тестовые задачи о строении простых молекулярных систем, содержащих атомы Li и C: о молекуле бензола, взаимодействующей с атомом Li,  $LiC_6H_6$ , и о молекуле карбида лития, Li-C.

Несмотря на кажущуюся простоту, вопрос о равновесной структуре комплекса бензола с литием окончательно не решен [7]. Даже с помощью очень точных методов пока не удается выяснить, эквивалентны ли в нем длины связей C-C и Li-C. Ясно лишь, что атом Li находится практически над центром шестиугольника из атомов углерода, а расстояния Li-C находятся в диапазоне 0,215–0,265 нм [7]. Расчеты, выполненные нами с помощью описанных выше инструментов, показывают наличие трех различных пар расстояний Li-C: 0,224, 0,234 и 0,239 нм. Связи C-C распадаются на две группы: 4 связи имеют длину 0,143 нм и 2 связи – 0,138 нм. Для карбида лития мы рассчитали изменение полной энергии системы как функцию расстояния между атомами. Результаты представлены на рис. 2. Энергия карбида лития и они демонстрируют хорошее согласие с данными работы [8], полученными как с учетом всех электронов, так и с использованием псевдопотенциала. Таким образом, можно заключить, что использованная нами методика расчета больших молекулярных систем (с числом атомов порядка сотни) не уступает существенно по точности более совершенным методам, пригодным для описания малых систем.

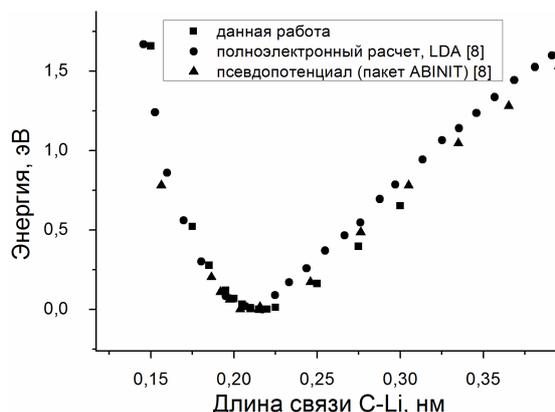


Рис. 2. Энергия карбида лития как функция расстояния между атомами углерода и лития

Параметры процесса моделирования, ответственные за статистическую надежность результатов, подбирались в серии предварительных численных экспериментов. В качестве стартовых выбирались конфигурации, которым при температуре  $T = 0$  соответствовал минимум энергии. Шаг по времени был взят равным 1 фс. При таком шаге уже через 100 шагов интегрирования уравнений движения диапазон флуктуаций температуры переставал изменяться, что позволяло считать температуру установившейся. Рис. 3 дает представление о характере флуктуаций температуры в установившемся режиме для комплекса УНТ (7,7) с 3 атомами лития.

Для оценки ряда свойств, например, электрического сопротивления, необходимо располагать ансамблем статистически независимых состояний системы, отвечающих данной температуре. Для определения характерного времени, спустя которое частицы «забывают» свое начальное состояние, вычислялась автокорреляционная функция скорости,  $ACF(t)$

$$ACF(t) = \langle V_i(0)V_i(t) \rangle / \langle V_i(0) \rangle, \quad (1)$$

где угловые скобки означают усреднение по ансамблю частиц системы. Оказалось, что функция  $ACF(t)$  для атомов углерода убывает до нуля за 12 шагов моделирования (см. подробности ниже). Поэтому, если фазовая траектория системы построена за 1500 шагов моделирования (при этом время расчетов с помощью выбранных нами средств еще останется разумным), то это позволит создать ансамбль из 120–130 независимых состояний системы. Мы предполагаем, что этого будет достаточно, чтобы дать надежную оценку структуры и свойств комплексов. Заметим, что «разумное время вычислений» у нас составляет ~5 суток и достигается при использовании 120 вычислительных ядер Intel Xeon X5680 (3,33 ГГц).

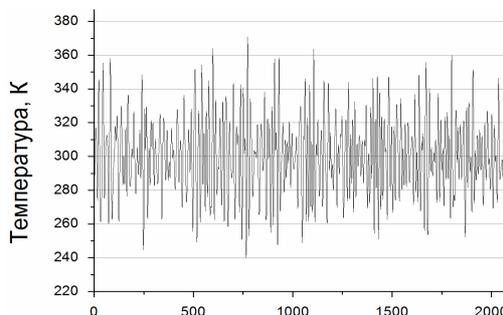


Рис. 3. Флуктуации температуры во фрагменте комплекса Li@(7,7)

### Результаты

Из расчетов следует, что выявленные в [5] тенденции в строении комплексов при  $T = 0$  К сохраняются для всех рассмотренных температур: атомы Li преимущественно располагаются вблизи стенки УНТ, связываясь в кластеры, когда их число  $n$  в моделируемом фрагменте комплекса станет больше двух. Представление о характере движения внедренного атома дает рис. 4, где представлены проекции его траектории на плоскость, перпендикулярную оси нанотрубки. Из рис. 4 видно, что при малых температурах движение атома лития является финитным.

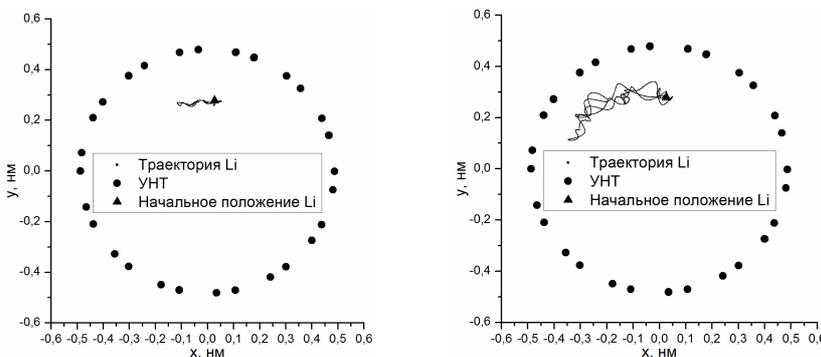


Рис. 4. Траектория атома лития (100 К – слева и 700 К – справа)

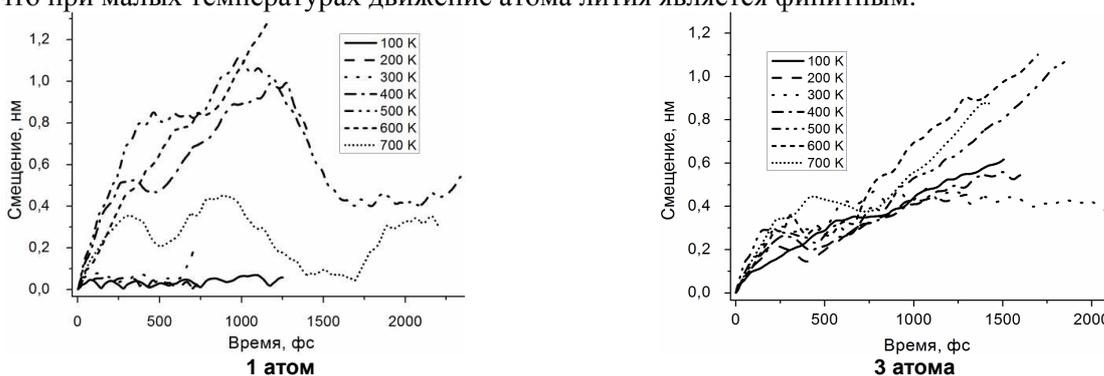


Рис. 5. Смещение атомов углерода и лития как функция времени при различных температурах

При больших температурах атом может удаляться из начального положения достаточно далеко, но и в этом случае расстояние от него до стенки нанотрубки изменяется мало (рис. 4). Более подробное исследование показывает (рис. 5), что при  $n = 1$  движение атома остается финитным (атом локализован в окрестности определенного шестиугольника из атомов углерода) при температурах вплоть до 300 К и происходит в окрестности его равновесного при  $T = 0$  положения. При более высоких температурах атом получает возможность переходить от одного шестиугольника к другому.

При  $n = 2$  доступная для движения область несколько увеличивается, но при  $T \leq 300$  К остается ограниченной. Интересно отметить, что при  $n = 3, 4$  движение образующихся кластеров не локализуется вблизи каких-либо мест углеродного каркаса УНТ даже при самой низкой из рассмотренных температур (см. рис. 5).

Динамические характеристики внедренных атомов оценивались также с помощью  $ACF(t)$  (1). Стартовые конфигурации получались случайным помещением атома лития в цилиндрический слой на расстояниях от 0,25 до 0,31 нм от оси нанотрубки. На рис. 6 приведены результаты расчета таких функций для случаев, когда  $n$  изменяется от 1 до 4. Видно, что при  $n = 1$  АФС в установившемся режиме движения испытывает незатухающие осцилляции с периодом около 100 фс, указывающие на колебательный характер движения атома Li около положений равновесия. С увеличением  $n$  амплитуда осцилляций уменьшается, так что при  $n = 4$  остаются лишь случайные флуктуации АКФ, определяемые, скорее всего, статистикой при усреднении в (1). Это указывает на постепенное исчезновение колебательного режима движения и развитие движения вдоль поверхности трубки. Отметим, что и в этом случае движение носит сложный характер и не сводится к направленному движению в определенном направлении.

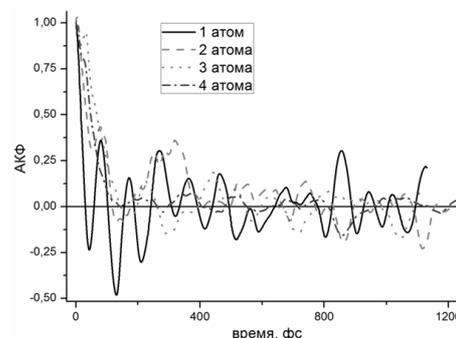


Рис. 6. Автокорреляционные функции скоростей атомов лития при 100 К

### Заключение

Проведенные расчеты показывают, что

- 1) Выявленные в [5] при  $T = 0$  тенденции структурообразования лития в комплексах Li@УНТ (преимущественное расположение не взаимодействующих между собой атомов Li вблизи стенки УНТ; образование кластеров Li при концентрациях более 2 ат. %) сохраняются и при конечных (до 700 К) температурах.
- 2) При низких температурах (до 300 К) и малых концентрациях (~1–2 ат. %) движение атомов лития локализуется в окрестности положений равновесия с редкими перескоками от одного положения к другому. При более высоких температурах движение становится инфинитным.
- 3) При концентрациях лития, превышающих порог кластерообразования ( $C_{Li} = 3 - 4$ ), движение кластеров оказывается инфинитным даже при самых низких из рассмотренных температур из-за ослабления связи атомов кластера со стенкой УНТ.

### Литература

1. Theoretical study of adsorption of lithium atom on carbon nanotube / M. Senami, Y. Ikeda, A. Fukushima, A. Tachibana // AIP Advances. – 2011. – Vol. 1. – P. 042106.
2. Interaction and concerted diffusion of lithium in a (5,5) carbon nanotube / M. Khantha, N.A. Cordero, J.A. Alonso *et al.* // Physical review B. – 2008. – Vol. 78. – P. 115430.
3. Созыкин, С.А. Электрические свойства комплексов углеродной нанотрубки (7,7) с одиночными атомами Li, Na, S и Se / С.А. Созыкин, В.П. Бескачко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2012. – Вып. 7. – № 34(293). – С. 113–119.
4. Созыкин, С.А. Механические свойства комплексов углеродной нанотрубки (7,7) с одиночными атомами Li, Na, S и Se / С.А. Созыкин, В.П. Бескачко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2012. – Вып. 7. – № 34(293). – С. 182–185.
5. Sozykin, S.A. Structure of endohedral complexes of carbon nanotubes encapsulated with lithium and sodium / S.A. Sozykin, V.P. Beskachko // Molecular Physics. – 2013. – Vol. 111. – Issue 7. – P. 930–938. DOI:10.1080/00268976.2012.760049
6. The Siesta method for ab initio order-N materials simulation / José M. Soler, Emilio Artacho, Julian D. Gale *et al.* // J. Phys.: Condens. Matter. – 2002. – Vol. 14. – P. 2745–2779.
7. Denis, P.A. C2V or C6V: Which is the most stable structure of the benzene–lithium complex? / P.A. Denis, F. Iribarne // Chemical Physics Letters. – 2013. – Vol. 573. – P. 15–18.

8. Electrical Transport in Single-Walled Carbon Nanotubes / M.J. Biercuk, S. Ilani, C.M. Marcus, and P.L. McEuen // Carbon Nanotubes, Topics in Applied Physics: сб. науч. тр. – 2008. – Vol. 111. – P. 455–493.

Поступила в редакцию 13 февраля 2014 г.

*Bulletin of the South Ural State University*  
*Series "Mathematics. Mechanics. Physics"*  
2014, vol. 6, no. 2, pp. 63–67

## ENDOEDRAL COMPLEXES OF CARBON NANOTUBES WITH LITHIUM AT FINITE TEMPERATURE

S.A. Sozykin<sup>1</sup>, V.P. Beskachko<sup>2</sup>

First principle molecular dynamics method is used to simulate the structure and dynamic properties of carbon nanotubes with lithium atoms in a cavity at temperature range of 100–700 K. It is shown that basic patterns in the structure of these complexes, revealed at  $T = 0$  K, are kept at all considered temperatures. The character of the motion of interstitial atoms depending on their concentration and temperature is studied. It is predicted that movement of atoms at low lithium concentrations becomes infinite at temperatures greater than 300 K. On the contrary, at concentrations above the threshold of clustering, the movement of clusters of lithium is infinite at the lowest of considered temperatures.

*Keywords:* carbon nanotubes, endohedral complexes, atomic structure and dynamics, computer simulation, molecular dynamics, first principal calculations.

### References

1. Senami M., Ikeda Y., Fukushima A., Tachibana A. Theoretical study of adsorption of lithium atom on carbon nanotube. *AIP Advances*. 2011. Vol. 1. pp. 042106.
2. Khantha M., Cordero N.A., Alonso J.A., Cawkwell M., Girifalco L.A. Interaction and concerted diffusion of lithium in a (5,5) carbon nanotube. *Physical review B*. 2008. Vol. 78. p. 115430.
3. Sozykin S.A., Beskachko V.P. Elektricheskie svoystva kompleksov uglerodnoy nanotrubki (7,7) s odinochnymi atomami Li, Na, S i Se (Electrical properties of carbon nanotube (7,7) complexes with single atoms Li, Na, S and Se). *Vestnik YuUrGU. Seriya "Matematika. Mekhanika. Fizika"*. 2012. Issue 7. no. 34(293). pp. 113–119. (in Russ.).
4. Sozykin S.A., Beskachko V.P. Mekhanicheskie svoystva kompleksov uglerodnoy nanotrubki (7,7) s odinochnymi atomami Li, Na, S i Se (Mechanical properties of the complexes of carbon nanotube (7,7) with single Li, Na, S and Se atoms). *Vestnik YuUrGU. Seriya "Matematika. Mekhanika. Fizika"*. 2012. Issue 7. no. 34(293). pp. 182–185. (in Russ.).
5. Sozykin S.A., Beskachko V.P. Structure of endohedral complexes of carbon nanotubes encapsulated with lithium and sodium. *Molecular Physics*. 2013. Vol. 111. Issue 7. pp. 930–938. DOI:10.1080/00268976.2012.760049
6. Soler José M., Artacho Emilio, Gale Julian D., García Alberto, Junquera Javier, Ordejón Pablo and Sánchez-Portal Daniel The Siesta method for ab initio order-N materials simulation. *J. Phys.: Condens. Matter*. 2002. Vol. 14. pp. 2745–2779.
7. Denis P.A., Iribarne F. C2V or C6V: Which is the most stable structure of the benzene–lithium complex? *Chemical Physics Letters*. 2013. Vol. 573. pp. 15–18. <http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2013.04.009>
8. Biercuk M.J., Ilani S., Marcus C.M., McEuen P.L. Electrical Transport in Single-Walled Carbon Nanotubes. *Carbon Nanotubes, Topics in Applied Physics*. 2008. Vol. 111. pp. 455–493.

Received 13 February 2014

<sup>1</sup> Sozykin Sergey Anatolevich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

E-mail: sergey.sozykin@gmail.com

<sup>2</sup> Beskachko Valeriy Petrovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

## ДВУМЕРНАЯ ФУНКЦИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ ИЗМЕРЕНИЙ ГАММА-ФОНА

А.А. Шульгинов<sup>1</sup>

Проведено исследование гамма-фона окружающей среды на предмет наличия тонкой структуры в распределении случайных величин, характеризующих процесс – количества всплесков за выделенный временной интервал, среднего интервала между всплесками и коэффициента вариации. Экспериментальные данные и результаты моделирования процесса показали возможность существования тонкой структуры (полиэкстремальности) функции распределения в силу естественных причин.

*Ключевые слова:* радиоактивность, функция распределения, статистика Пуассона, коэффициент вариации, полиэкстремальность.

### Введение

На протяжении более 40 лет научный коллектив, возглавляемый С.Э. Шнолем, проводил исследования закономерностей различных физических, химических и биологических процессов [1]. Было обнаружено, что радиоактивный распад – это процесс, который подчиняется статистике Пуассона, но гистограмма распределения имеет тонкую структуру – множественные пики и впадины (полиэкстремальность). Аналогичные результаты были получены при изучении закономерностей химических реакций и биологических процессов. Более того, авторы исследования доказали, что форма тонкой структуры процессов разной природы подвержена периодическим изменениям с периодами 24 ч, около 27 суток и 365 суток, однако этим фактам не было дано никаких объяснений и не было выдвинуто никаких гипотез о возможных механизмах возникновения этих явлений. На основании этих результатов можно сделать предположение о существовании неизвестной космофизической причины, которая влияет на случайные процессы различной природы. Эта публикация вызвала дискуссию в научных кругах. В частности, Е.А. Кушниренко и И.Б. Погожев дали критические замечания к статье С.Э. Шноля [2]. В своих комментариях авторы предположили, что в работе не хватает оценок статистической значимости, которые помогают отделить твёрдо установленные научные факты от правдоподобных предположений и научных гипотез.

На протяжении 10 лет А.В. Каравайкин работал над созданием устройства, которое способно повлиять на процесс радиоактивного распада [3]. По его утверждению, ему удалось создать прибор «НГК-ВЕГА» – генератор неэлектромагнитной информации. А.В. Каравайкин совместно с А.Г. Пархомовым провели измерения влияния излучения этого генератора на процесс радиоактивного распада препарата  $\text{Co}^{60}$  [4]. Оказалось, что такое воздействие никак не сказалось на средней активности препарата, но значительно уменьшило разброс результатов измерений. Это дало основание авторам исследования утверждать о возможности управления хаотическими явлениями, такими, как радиоактивный распад. Эти выводы столь фундаментальны и совершенно изменяют устоявшиеся представления о закономерностях хорошо изученных ранее физических явлений, что нуждаются в тщательной проверке независимыми исследователями.

### Измерения гамма-фона

В настоящей статье представлены результаты исследования гамма-фона. Измерения проводились в одной из лабораторий Южно-Уральского государственного университета в круглосуточном режиме на протяжении 7 суток. Счётчик Гейгера с трубкой СБМ-20 был соединён с компьютером. Никаких источников радиоактивного излучения вблизи трубки Гейгера не было. Счёт производился непрерывно, но результаты измерений записывались с периодом 32,8 с. Всего было зафиксировано  $N = 16\,300$  временных интервалов. Помимо текущего времени, в файл записывались следующие данные за каждый период  $j$  ( $j = 1, \dots, N$ ):  $N_j$  – число всплесков,  $R_j$  – средний вре-

<sup>1</sup> Шульгинов Александр Анатольевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра общей и экспериментальной физики, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: shulginovaa@susu.ac.ru; a.a.shulginov@yandex.ru

менной интервал между всплесками и  $V_{R_j}$  – коэффициент вариации временных интервалов между всплесками (среднеквадратичное отклонение, делённое на среднюю величину –  $\sigma_{R_j}/R_j$ ). Число всплесков за определённый период должно иметь распределение Пуассона, а интервалы между всплесками – экспоненциальное распределение. Согласно [5], коэффициент вариации  $V_{R_j}$  экспоненциального распределения равен 1, а для пуассоновского процесса коэффициент вариации  $V_{N_j} = 1/\sqrt{\langle N_j \rangle}$ . Гистограмма количества скачков  $N_j$  в течение выбранного интервала времени имела вид пуассоновского распределения. Никакой тонкой структуры, а тем более полиэкстремальности, гистограммы не отмечено. В дополнение к этому, было произведено моделирование процесса. При моделировании процесса учитывалось, что трубка Гейгера после всплеска в течение 0,2 с не регистрировала частицы (время латентности). Поэтому процесс не являлся чисто пуассоновским. Полагалось, что усреднённый по  $N$  измерениям средний временной интервал между всплесками, полученный в эксперименте ( $\langle R_j \rangle = 2,17$  с), такой же, как и при моделировании. В то же время, усреднённый по  $N$  измерениям коэффициент вариации случайной величины  $R_j$  по экспериментальным данным оказался равным  $\langle V_{R_j}^{\text{эксп}} \rangle = 0,89$ , а при моделировании  $\langle V_{R_j}^{\text{модел}} \rangle = 0,81$ . Это указывает на то, что при моделировании не были учтены какие-то факторы. На это же указывает некоторое отличие в ширине гистограмм ( $V_{N_j} = 0,228$ ,  $1/\sqrt{\langle N_j \rangle} = 0,248$ ).

Неожиданные результаты были получены при построении функции плотности вероятности нормированного среднего интервала между всплесками  $\tilde{R}_j = (R_j - M(R_j))/\sigma_{R_j}$  (рис. 1). Оказалось, что  $f(\tilde{R}_j)$  не является гауссовой кривой, как можно было ожидать, а имеет тонкую структуру, в которой проявляется полиэкстремальность. Столь же интересные результаты были получены при построении функции плотности вероятности от двух переменных –  $\tilde{R}_j$  и  $\tilde{V}_j = (V_j - M(V_j))/\sigma_{V_j}$  (рис. 2). Количество временных интервалов при моделировании варьировалось от 20 млн. до 200 млн. Это не повлияло на график существенно. Дополнительно было проведено моделирование процесса при условии, что время латентности трубки СБМ-20 равно нулю. Это лишь немного изменило форму изолиний, но тонкая структура осталась подобной.

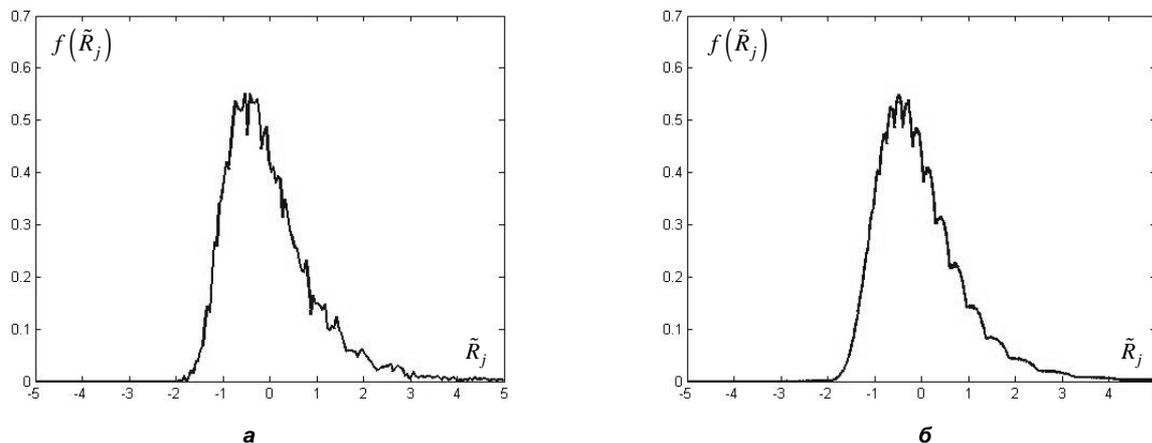


Рис 1. Функция плотности вероятности  $f(\tilde{R}_j)$ , полученная по экспериментальным данным (а) и путём моделирования (б)

## Выводы

- 1) Обнаружена полиэкстремальность функции распределения гамма-фона.
- 2) Тонкая структура распределения случайных величин, например, среднего временного интервала между всплесками тока в трубке Гейгера может проявиться по естественным причинам, даже если не предполагать влияние космофизических условий.

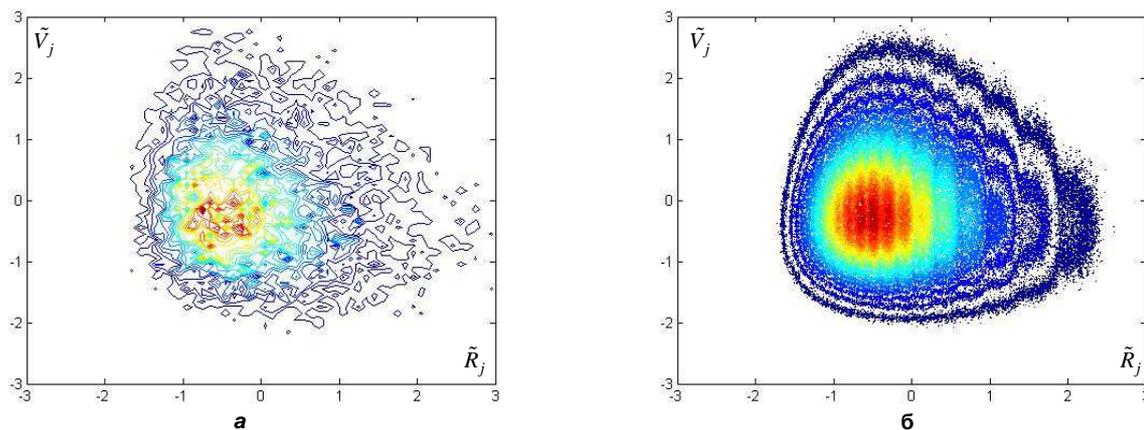


Рис 2. Изолинии функции плотности вероятности  $f(\tilde{R}_j, \tilde{V}_j)$ , полученные по экспериментальным данным (а) и путём моделирования (б)

### Литература

1. О реализации дискретных состояний в ходе флуктуаций в макроскопических процессах / С.Э. Шноль, В.А. Коломбет, Э.В. Пожарский и др. // УФН. – 1998. – Т. 168, № 10. – С. 1128–1140.
2. Кушниренко, Е.А. Комментарии к статье С.Э. Шноля и др. / Е.А. Кушниренко, И.Б. Погосев // УФН. – 2000. – Т. 170, № 2. – С. 213–214.
3. Каравайкин, А.В. Некоторые вопросы неэлектромагнитной кибернетики / А.В. Каравайкин. – М.: Наука, 2005. – 288 с.
4. Пархомов, А.Г. Космос. Земля. Человек. Новые грани науки / А.Г. Пархомов. – М.: Наука, 2009. – 272 с.
5. Кобзарь, А.И. Прикладная математическая статистика. Для инженеров и научных работников / А.И. Кобзарь. – М.: Физматлит, 2006. – 816 с.

*Поступила в редакцию 11 ноября 2013 г.*

**TWO-DIMENSIONAL DISTRIBUTION FUNCTION FOR THE RESULTS OF GAMMA BACKGROUND MEASURING****A.A. Shulginov<sup>1</sup>**

Gamma-background of the environment is analyzed for the presence of fine structure in the distribution of random variables characterizing the process that is the number of bursts for the selected time interval, the average interval between peaks and coefficient of variation. Experimental data and the results of simulation have shown the possibility of the existence of fine structure (polyextremality) for distribution function due to natural causes.

*Keywords:* radioactivity, distribution function, Poisson statistics, coefficient of variation, polyextremality.

**References**

1. Shnoll S.E., Kolombet V.A., Pozharskii E.V., Zenchenko T.A., Zvereva I.M., Konradov A.A. Realization of discrete states during fluctuations in macroscopic processes. *Phys. Usp.* 1998. Vol. 41 pp. 1025–1035. DOI: 10.1070/PU1998v041n10ABEH000463
2. Kushnirenko E.A., Pogozhev I.B. Comment on the paper by S.E. Shnoll et al. *Phys. Usp.* Vol. 43. pp. 203–204. DOI: 10.1070/PU2000v043n02ABEH000637
3. Karavaykin A.V. *Nekotorye voprosy neelektromagnitnoy kibernetiki* (Some questions nonelectromagnetic cybernetics). Moscow, Nauka Publ., 2005. 288 p. (in Russ.).
4. Parkhomov A.G. *Kosmos. Zemlya. Chelovek. Novye grani nauki* (Space. Earth. People. New facets of science). Moscow, Nauka Publ., 2009. 272 p. (in Russ.).
5. Kobzar' A.I. *Prikladnaya matematicheskaya statistika. Dlya inzhenerov i nauchnykh rabotnikov* (Applied Mathematical Statistics. For engineers and scientists). Moscow, Fizmatlit Publ., 2006. 816 p. (in Russ.).

*Received 11 November 2013*

---

<sup>1</sup> Shulginov Alexandr Anatolyevich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, General and Experimental Physics Department, South Ural State University.

E-mail: shulginovaa@susu.ac.ru; a.a.shulginov@yandex.ru

# Краткие сообщения

УДК 533.9

## МОДЕЛИРОВАНИЕ РАДИОЧАСТОТНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПЛАЗМЕННЫХ ОБРАЗОВАНИЙ ДЛЯ ГИПЕРЗВУКОВОГО ОБЪЕКТА В МЕЗОСФЕРЕ ЗЕМЛИ

А.Е. Баринов<sup>1</sup>, И.И. Прокопов<sup>2</sup>, В.И. Тамбовцев<sup>3</sup>

Определяется область радиопрозрачности для столкновительного ионизованного газа. Анализируются основные радиочастотные параметры возмущённой среды в безразмерных координатах. Работа связана с решением проблемы обеспечения радиосвязи с аппаратами, движущимися в мезосфере с гиперзвуковой скоростью.

*Ключевые слова:* мезосфера, ионизованный газ, частота столкновений, плазменная частота, фазово-частотная характеристика, частотная характеристика поглощения, критические частоты, скин-слой.

### Введение

При движении аппаратов в мезосфере со скоростями, превышающими скорость звука более чем в шесть раз, образующаяся вокруг аппарата ударная волна начинает проявлять свойства ионизованного газа и газовой плазмы [1]. При этом возникают сбои радиообмена в диапазонах частот, используемых в системах спутниковой навигации, радиолокации и радиосвязи [2]. Это делает проблематичным оперативное управление гиперзвуковым аппаратом и затрудняет установление причин отказов функционирования технических устройств. Проблема существует с первых дней пилотируемой космонавтики. Для разработки методов и аппаратуры, позволяющих обеспечить бесперебойную радиосвязь, необходимо изучить функции затухания и фазы, которые показывают, как и с какими потерями радиоволны распространяются в исследуемой среде [3]. Интерес представляет исследование и радиоотражательных свойств возмущённой среды. Работа предопределяет появление ракетопланов (без окислителя) для полётов в мезосфере Земли.

### Распространение волны через исследуемую среду

При вхождении в мезосферу Земли спускаемых аппаратов или при движении гиперзвуковых аппаратов вокруг них образуется плазменная оболочка. Толщина фронта ударной волны имеет порядок длины свободного пробега молекул, что позволяет в расчётах фронт заменить поверхностью разрыва. За фронтом газ образует по направлению  $Z$  слоистую структуру, но в центральной части газ относительно однородный. Разогрев газа приводит к его ионизации и, как следствие, отрицательно сказывается на радиообмене [2].

Газовая плазма отличается от столкновительного ионизованного газа наличием коллективных электродинамических процессов. В частности, возникают электронные плазменные колебания, развитию которых препятствуют, в основном, столкновения электронов, как наиболее подвижных частиц. Распространение радиоволн связано с этими процессами.

Итак, основными радиофизическими характеристиками исследуемой среды являются частота столкновений электронов  $\nu_e$  и плазменная частота  $\omega_p$  (в системе СИ):

$$\nu_e = \frac{u_e}{\lambda} \text{ и } \omega_p = \left( \frac{n_e e^2}{\epsilon_0 m_e} \right)^{1/2}. \quad (1)$$

<sup>1</sup> Баринов Андрей Евгеньевич – аспирант, старший преподаватель, Южно-Уральский Государственный Университет.  
E-mail: barinov\_ae@bk.ru

<sup>2</sup> Прокопов Игорь Игоревич – доцент, кафедра Инфокоммуникационные технологии, Южно-Уральский государственный университет.  
E-mail: prokopov174@mail.ru

<sup>3</sup> Тамбовцев Владимир Иванович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра Инфокоммуникационные технологии, Южно-Уральский государственный университет.  
E-mail: tamboval@mail.ru

Рассмотрим два принципиально различных состояния [4].

А. Неплазменное состояние столкновительного ионизованного газа – СИГ при  $2\pi\nu_e > \omega_p$  (здесь  $\omega_p$  – расчётный параметр). На толщине скин-слоя  $\delta$  поглощение происходит практически без отражения. Заметим, что диапазон перехода к радиопрозрачности здесь чётко не определен.

В. Плазменное состояние столкновительного ионизованного газа – СГП, если  $2\pi\nu_e < \omega_p$ . Среда становится радиопрозрачной при  $\omega \approx \omega_p$ . Отражение наблюдается при частоте  $\omega$  ниже  $\omega_p$  при  $\omega > 2\pi\nu_e$  – это позволяет определить частотную границу перехода к радиопрозрачности.

Для фазовой функции  $-\beta$  и функции затухания  $-\alpha$  известны частотные зависимости [5]:

$$\beta^2 = \frac{\omega}{2c^2(\nu_e^2 + \omega^2)} \left( \sqrt{\omega^2(\nu_e^2 + \omega^2 - \omega_p^2)^2 + \nu_e^2 \omega_p^4} + \omega(\nu_e^2 + \omega^2 - \omega_p^2) \right), \quad (2)$$

$$\alpha^2 = \frac{\omega}{2c^2(\nu_e^2 + \omega^2)} \left( \sqrt{\omega^2(\nu_e^2 + \omega^2 - \omega_p^2)^2 + \nu_e^2 \omega_p^4} - \omega(\nu_e^2 + \omega^2 - \omega_p^2) \right). \quad (3)$$

Исследуем данные выражения графоаналитическим методом. Исследование функций данным методом позволит наглядно увидеть изменение их значений в зависимости от частоты проходящей электромагнитной волны. Очевидно, что данные функции представляют собой достаточно сложные для точного построения графиков нелинейные зависимости. Для построения графиков данных функций используется система компьютерной алгебры MathCAD [6].

### Построение модельных зависимостей для СИГ

Для исследования (2) и (3) приведём частоты к относительному виду. Данная операция позволит удобно оценивать и воспринимать более широкий диапазон частот. Итак, в правых частях уравнений (2) и (3) введём относительные частоты:

$$\nu_r = \frac{\omega}{2\pi\nu_e} - \omega \text{ относительно } \nu_e; \quad \nu_{rp} = \frac{\omega_p}{2\pi\nu_e} - \omega_p \text{ относительно } \nu_e. \quad (4)$$

Сохраним в левых частях (2) и (3) безразмерную форму записи в виде

$$\beta_A^2 = \beta^2 \frac{c^2}{\nu_e^2}; \quad \alpha_A^2 = \alpha^2 \frac{c^2}{\nu_e^2}. \quad (5)$$

После выполнения подстановок для построения модельных зависимостей получаем:

$$\beta_A^2 = \frac{2\pi^2\nu_r^2}{\omega(1+4\pi^2\nu_r^2)} \left( \sqrt{\omega^2(1+4\pi^2(\nu_r^2 - \nu_{rp}^2))^2 + 16\pi^4\nu_{rp}^4\nu_e^2} + \omega(1+4\pi^2(\nu_r^2 - \nu_{rp}^2)) \right), \quad (6)$$

$$\alpha_A^2 = \frac{2\pi^2\nu_r^2}{\omega(1+4\pi^2\nu_r^2)} \left( \sqrt{\omega^2(1+4\pi^2(\nu_r^2 - \nu_{rp}^2))^2 + 16\pi^4\nu_{rp}^4\nu_e^2} - \omega(1+4\pi^2(\nu_r^2 - \nu_{rp}^2)) \right). \quad (7)$$

Модельные зависимости для СИГ представлены на рис. 1, а и на рис. 1, б для случаев: 1)  $\nu_{rp} = 1/30$ ; 2)  $\nu_{rp} = 1/20$ ; 3)  $\nu_{rp} = 1/10$ ; 4)  $\nu_{rp} = 1/2\pi$ .

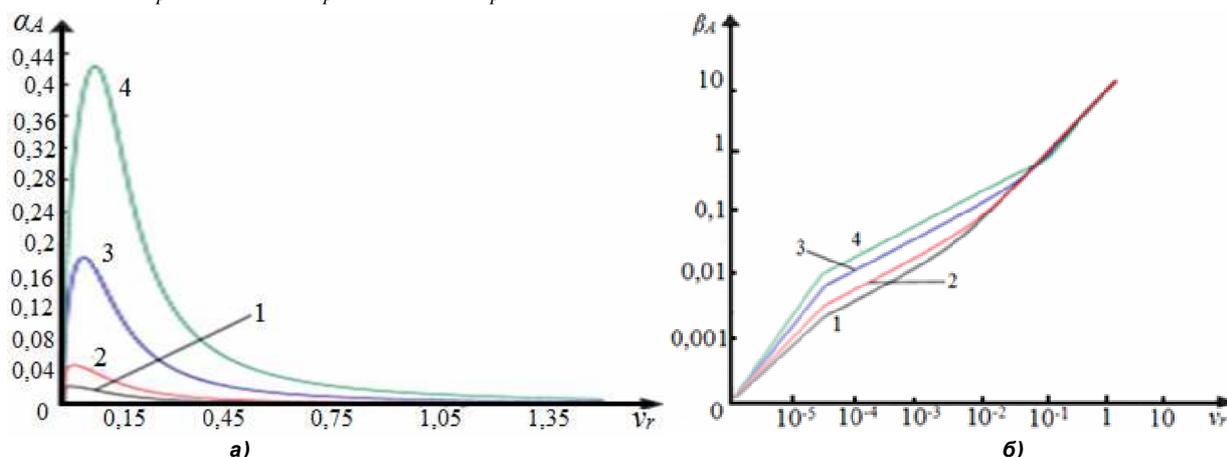


Рис. 1. а) зависимости функций затухания в СИГ от относительной частоты; б) зависимости фазовых функций в СИГ от относительной частоты.

## Краткие сообщения

Для анализа изменения глубины проникновения электромагнитной волны в среду воспользуемся определением зависимости глубины скин-слоя  $\delta$  от частоты, как обратной зависимости от функции затухания [4], – здесь это касается выражения (7). Для СИГ с исследуемыми параметрами (см. рис. 1) частотные зависимости для  $\delta$  представлены на рис. 2.

Анализ представленных здесь частотных зависимостей показывает, что действительно для СИГ необходимо доопределить значение частоты или частотный диапазон перехода к радиопрозрачности (см. А). Однако, на рис. 1, б на фазовых частотных зависимостях можно отметить особую частотную область, где графики сливаются в линию одинакового наклона. Окончательно это происходит при единичной относительной частоте.

При передаче информации по радиоканалу как физическому носителю сигнала для сохранения формы последнего необходимо условием является высокая степень линейности сквозной частотной характеристики канала для рабочей полосы частот. Расчёты показывают, что для всех представленных в статье частотных характеристик коэффициенты корреляций составили 0,96...0,98 на участках 1...1,5 относительных частот.

### Построение модельных зависимостей для СГП

В правых частях уравнений (2) и (3) введём относительные частоты:

$$v_r = \frac{\omega}{\omega_p} - \omega \text{ относительно } \omega_p, \quad v_{re} = \frac{v_e}{\omega_p} - v_e \text{ относительно } \omega_p. \quad (8)$$

Тогда

$$\alpha_B^2 = \frac{v_r}{2(v_{re}^2 + v_r^2)} \left( \sqrt{v_r^2(v_{re}^2 + v_r^2 - 1)^2 + v_{re}^2} - v_r(v_{re}^2 + v_r^2 - 1) \right), \quad (9)$$

$$\beta_B^2 = \frac{v_r}{2(v_{re}^2 + v_r^2)} \left( \sqrt{v_r^2(v_{re}^2 + v_r^2 - 1)^2 + v_{re}^2} + v_r(v_{re}^2 + v_r^2 - 1) \right), \quad (10)$$

где

$$\beta_B^2 = \beta^2 \frac{c^2}{\omega_p^2}; \quad \alpha_B^2 = \alpha^2 \frac{c^2}{\omega_p^2}. \quad (11)$$

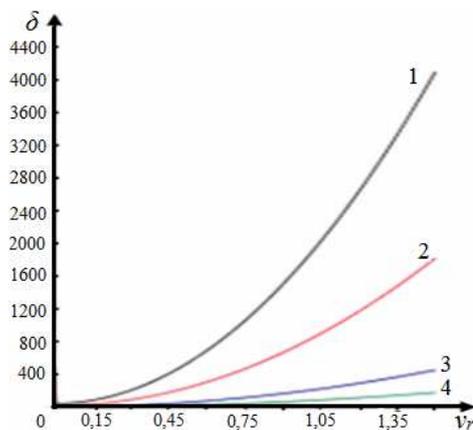


Рис. 2. Зависимости глубины скин-слоя от  $v_r$  – относительной частоты для СИГ

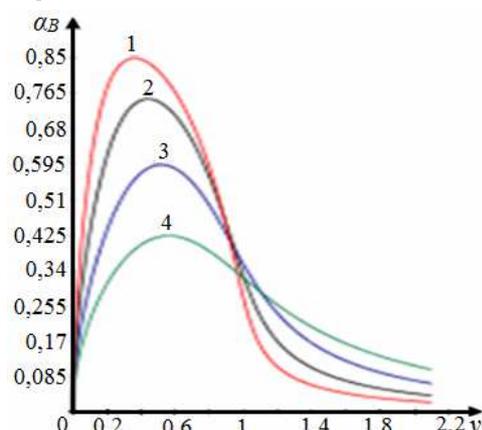


Рис. 3. Зависимости функций затухания от  $v_r$  – относительной частоты для СГП

Модельные зависимости для СГП представлены на рис. 3, рис. 4, а и рис. 4, б для заданных параметров: 1)  $v_{re} = 1/\sqrt{30}$ , 2)  $1/\sqrt{10}$ , 3)  $1/\sqrt{3}$ , 4) 1.

Анализ представленных здесь частотных функций показывает, что действительно значение частоты перехода к радиопрозрачности для СГП определяется выражением:  $\omega > 2\pi v_e$  (см. В), что соответствует относительной частоте  $v_r = \omega/\omega_p$  равной 1. Необходимо заметить, что на низких частотах (меньше 0,5 относительной частоты) функции затухания уменьшаются, т.к. длины волн превышают расчётные значения скин-слоя [2].

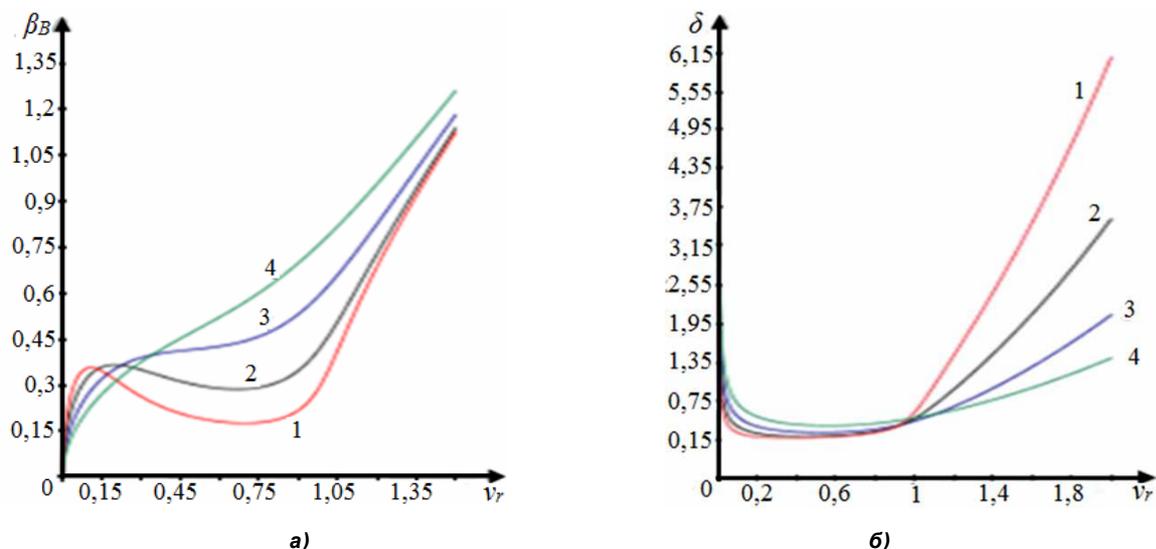


Рис. 4. а) Зависимости фазовой функции в СГП от относительной частоты; б) зависимости глубины скин-слоя в СГП от относительной частоты

### Выводы

Анализируя полученные зависимости, можно отметить, что для СИГ, среда становится прозрачна для радиоволн уже при значении их частоты незначительно превышающем частоту электрон-атомных столкновений (в 1,5–2 раза), что выражается в линейности фазовой зависимости и стремящейся к нулю постоянной затухания. Для СГП прозрачность среды наступает с превышением частоты радиоволн значения плазменной частоты, и также выражается в линейности зависимости фазовой постоянной и стремящейся к нулю постоянной затухания. Известно [2, 7], что для СГП критическая частота достигает значения 10 ГГц на высоте 70 км.

Переход от безразмерных к абсолютным параметрам не требует каких-либо дополнительных математических преобразований и сводится лишь к умножению. Для поиска оптимальной частоты, зная параметры среды ( $\nu_e$  и  $\omega_p$ ) и толщину плазменного слоя, находится минимальная относительная частота для осуществления радиосвязи. По зависимостям для фазовых функций определяется их линейность для полосы частотного диапазона канала связи.

### Литература

1. Wolverson, M. Piercing the Plasma: Ideas to Beat the Communications Blackout of Reentry / M. Wolverson // Scientific American. – New York: Scientific American, 2009. – № 12. – P. 28–29.
2. Шевяков, И.А. О радиопрозрачности плазменной оболочки гиперзвукового летательного аппарата / И.А. Шевяков // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2014. – Т. 6, № 2. – С. 80–84.
3. Грудинская, Г.П. Распространение радиоволн. Учебное пособие для радиотехнических специальностей вузов, 2-е изд. / Г.П. Грудинская. – М.: ВШ, 1975. – 280 с.
4. Шевяков, И.А. Радиофизические свойства столкновительной плазмы газового разряда / И.А. Шевяков, В.И. Тамбовцев, А.А. Кучуркин // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Т. 5, № 1. – С. 100–106.
5. Голант, В.Е. СВЧ методы исследования плазмы / В.Е. Голант. – М.: Наука, 1968. – 328 с.
6. Баринов, А.Е. Моделирование прозрачности плазменного слоя в системе Mathcad / А.Е. Баринов, И.А. Шевяков, И.И. Прокопов // Труды 56-й научной конференции МФТИ. Радиотехника и кибернетика. – МФТИ, 2013. – С. 172–173.
7. Тамбовцев, В.И. Оценка затухания радиосигнала при прохождении ударной волны гиперзвукового аппарата / В.И. Тамбовцев, И.А. Шевяков // Труды 56-й научной конференции МФТИ. Радиотехника и кибернетика. – МФТИ, 2013. – С. 188–190.

Поступила в редакцию 24 января 2014 г.

### MODELING OF RADIO FREQUENCY CHARACTERISTICS OF PLASMA FORMATIONS FOR HYPERSONIC OBJECT IN MESOSPHERE OF THE EARTH

**A.E. Barinov<sup>1</sup>, I.I. Prokopov<sup>2</sup>, V.I. Tambovtsev<sup>3</sup>**

The area of radiotransparency for collisional ionized gas is defined. Basic RF parameters of perturbed environment are analyzed in nondimensional coordinates. The article considers the problem of radio coverage with vehicles moving in mesosphere at hypersonic speed.

*Keywords: mesosphere, ionized gas, collision frequency, plasma frequency, phase-frequency characteristic, frequency response of absorption, critical frequency, skin layer.*

#### References

1. Wolverton M. Piercing the Plasma: Ideas to Beat the Communications Blackout of Reentry. *Scientific American*. New York: Scientific American. 2009. no. 12. pp. 28–29.
2. Shevyakov I.A. O radioprozrachnosti plazmennoy obolochki giperzvukovogo letatel'nogo apparata (Radio Transparency of Plasma Shell for Hypersonic Aircraft). *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika. Mekhanika. Fizika»*. 2014. Vol. 6, no. 2. pp. 80–84. (in Russ.).
3. Grudinskaya G.P. *Rasprostraneniye radiovoln. Uchebnoye posobie dlya radiotekhnicheskikh spetsial'nostey vuzov* (Radio Wave Propagation. Study Guide for Radio Engineering Specialists of Higher Educational Institutions). Moscow, Vysshaya Shkola Publ., 1975. 280 p. (in Russ.).
4. Shevyakov I.A., Tambovtsev V.I., Kuchurkin A.A. Radiofizicheskie svoystva stolknovitel'noy plazmy gazovogo razryada (Radio physical properties of collisional plasma in gas discharge). *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika. Mekhanika. Fizika»*. 2013. Vol. 5, no. 1. pp. 100–106. (in Russ.).
5. Golant V.E. *SVCh metody issledovaniya plazmy* (Super high frequency methods of plasma analysis). Moscow, Nauka Publ., 1968. 328 p.
6. Barinov A.E., Shevyakov I.A., Prokopov I.I. Modelirovaniye prozrachnosti plazmennogo sloya v sisteme Mathcad (Simulation of the plasma layer transparency in the system Mathcad). *Trudy 56-y nauchnoy konferentsii MFTI. Radiotekhnika i kibernetika* (Proceedings of the 56th scientific conference of MIPT. Radio Engineering and Cybernetics). MFTI, 2013. pp. 172–173. (in Russ.).
7. Tambovtsev V.I., Shevyakov I.A. Otsenka zatukhaniya radiosignala pri prokhozhdenii udarnoy volny giperzvukovogo apparata (Radio Signal Fading Evaluation in Passing a Hypersonic Shock Wave Device) *Trudy 56-y nauchnoy konferentsii MFTI. Radiotekhnika i kibernetika* (Proceedings of the 56th scientific conference of MIPT. Radio Engineering and Cybernetics). MFTI, 2013. pp. 188–190. (in Russ.).

*Received 24 January 2014*

---

<sup>1</sup> Barinov Andrey Evgenievich is Post-graduate Student, Senior Lecturer, South Ural State University.  
E-mail: barinov\_ae@bk.ru

<sup>2</sup> Prokopov Igor Igorevich is Associate Professor, Information and Communication Technologies Department, South Ural State University.  
E-mail: tamboval@mail.ru

<sup>3</sup> Tambovtsev Vladimir Ivanovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Information and Communication Technologies Department, South Ural State University.  
E-mail: tamboval@mail.ru

# ПОЛНЫЙ СПИСОК ПОЛНЫХ $k$ -ДУГ В ПРОЕКТИВНОЙ ПЛОСКОСТИ ПОРЯДКА 9 НАД ПРАВЫМ ПОЧТИ-ПОЛЕМ ДЛЯ $k = 8, 9, 10^1$

**А.М. Шарафутдинова<sup>2</sup>**

Найден полный список, с точностью до изоморфизма, полных  $k$ -дуг плоскости сдвигов порядка 9 для  $k = 8, 9, 10$ . Метод исследования основан на двойственности плоскости сдвигов и плоскости трансляций.

*Ключевые слова:* плоскость сдвигов порядка 9, плоскость трансляций порядка 9, полные дуги.

Одним из важных аспектов исследования конечной проективной плоскости (КПП) данного порядка является изучение  $k$ -дуг в данной КПП.

*Определение 1.*  $k$ - дугой КПП называется множество из  $k$  точек этой КПП, любые три из которых не лежат на одной прямой.

В трех известных проективных плоскостях порядка 9: дезарговой, трансляций и хьюзовой, полное исследование  $k$ -дуг было проведено ранее [1]. Для четвертой известной плоскости, плоскости сдвигов, аналогичное исследование осложнялось отсутствием необходимых сведений о группе коллинеаций этой плоскости.

Для решения указанной задачи мы применили метод исследования, основанный на двойственности плоскости сдвигов и плоскости трансляций. Наша цель – продолжить исследование  $k$ -сторонников, которое было проведено ранее для  $k=1, 2, 3$  в [2], до значений  $k = 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10$  с помощью метода поэтапных отождествлений [3]. На первом этапе мы получили список всех опорных  $k$ -сторонников в плоскости трансляций, с точностью до изоморфизма, затем по определенному правилу перехода [2] преобразовали их в  $k$ -дуги плоскости сдвигов.

*Определение 2.*  $k$ -сторонник называется полным, если он не является собственной частью  $(k+1)$ -сторонника.

Полнота  $k$ -сторонника возможна лишь в том случае, если множество допустимых прямых данного  $k$ -сторонника пусто.

**Теорема 1.** В плоскости трансляций порядка 9 имеются 45 типов полных восьмисторонников, 1 тип полных девятисторонников, 1 тип полных десятисторонников.

Поскольку каждый опорный  $k$ -сторонник плоскости трансляций преобразуется в опорную  $k$ -дугу плоскости сдвигов, справедлива следующая теорема.

**Теорема 2.** Плоскость сдвигов порядка 9 содержит 45 типов полных 8-дуг, 1 тип полных 9-дуг, 1 тип полных 10-дуг.

Результаты исследования полных  $k$ -дуг плоскости сдвигов порядка 9 приведены в таблице 1, где  $S_i^k$  – полная опорная  $k$ -дуга с номером  $i$  (в лексикографическом порядке),  $|G_i^k|$  – порядок группы автоморфизмов  $k$ -дуги,  $N_i^k$  – общее число  $k$ -дуг, изоморфных  $S_i^k$ .

Результаты исследования полных  $k$ -дуг плоскости сдвигов порядка 9 для  $k = 8, 9, 10$

$i$	$S_i^k$	$ G_i^k $	$N_i^k$
$k = 8$			
1	$\infty, 0, 00, 11, 23, 32, 46, 75$	1	311040
2	$\infty, 0, 00, 11, 23, 32, 46, 84$	4	77760
3	$\infty, 0, 00, 11, 23, 46, 52, 67$	1	311040
4	$\infty, 0, 00, 11, 23, 47, 64, 75$	2	155520

<sup>1</sup> Работа была поддержана грантом Министерства образования России в рамках государственного задания Челябинскому государственному педагогическому университету.

<sup>2</sup> Шарафутдинова Анна Михайловна – аспирант, кафедра математики и методики обучения математике, лаборатория дискретной математики, физико-математический факультет, Челябинский государственный педагогический университет.

E-mail: anna.sharafutdinova.88@mail.ru

## Краткие сообщения

5	$\infty, 0, 00, 11, 23, 47, 64, 82$	3	103680
6	0, 00, 2, 01, 13, 14, 38, 45	2	155520
7	0, 00, 2, 01, 13, 14, 38, 82	2	155520
11	0, 00, 2, 01, 13, 17, 38, 55	2	155520
12	0, 00, 2, 01, 13, 17, 38, 66	2	155520
13	0, 00, 2, 01, 13, 17, 38, 82	1	311040
14	0, 00, 2, 01, 13, 17, 42, 45	2	155520
16	0, 00, 2, 01, 13, 34, 35, 77	1	311040
17	0, 00, 2, 01, 13, 34, 56, 62	1	311040
18	0, 00, 2, 01, 32, 33, 65, 67	8	38880
19	0, 00, 2, 01, 32, 33, 76, 87	2	155520
20	0, 00, 2, 01, 32, 35, 74, 76	2	155520
21	0, 00, 2, 01, 32, 38, 44, 45	4	77760
22	0, 00, 2, 01, 32, 38, 66, 67	16	19440
23	0, 00, 2, 01, 32, 38, 76, 87	4	77760
24	0, 00, 2, 01, 32, 44, 67, 83	4	77760
25	0, 00, 2, 11, 13, 24, 35, 72	1	311040
26	0, 00, 2, 11, 13, 27, 62, 68	2	155520
27	0, 00, 2, 11, 13, 34, 35, 87	1	311040
28	0, 00, 2, 11, 13, 34, 37, 45	1	311040
29	0, 00, 2, 11, 13, 35, 37, 72	1	311040
30	0, 00, 2, 11, 13, 35, 64, 68	2	155520
31	0, 00, 2, 11, 23, 24, 35, 72	1	311040
32	0, 00, 2, 11, 32, 37, 43, 45	2	155520
33	0, 00, 2, 11, 32, 43, 45, 76	1	311040
34	0, 00, 2, 11, 34, 35, 86, 87	4	77760
35	0, 00, 2, 13, 14, 38, 82, 87	1	311040
37	0, 00, 2, 13, 16, 37, 38, 51	1	311040
38	0, 00, 2, 13, 18, 34, 42, 86	1	311040
39	0, 2, 10, 11, 32, 33, 75, 76	6	51840
40	0, 2, 10, 11, 32, 34, 75, 78	2	155520
43	0, 2, 10, 11, 32, 36, 54, 55	8	38880
44	0, 2, 10, 11, 32, 54, 63, 88	2	155520
46	0, 2, 10, 13, 34, 35, 56, 57	3	103680
47	0, 2, 10, 13, 34, 35, 56, 72	2	155520
48	0, 2, 10, 13, 34, 35, 57, 78	2	155520
49	0, 2, 10, 13, 34, 45, 47, 68	2	155520
50	0, 2, 10, 13, 34, 45, 51, 62	2	155520
51	0, 2, 10, 21, 32, 44, 65, 88	6	51840
52	0, 2, 10, 23, 31, 42, 65, 84	4	77760
53	0, 2, 10, 23, 34, 45, 56, 88	1	311040
$k = 9$			
3	0, 2, 10, 11, 32, 36, 43, 44, 78	4	77760
$k = 10$			
1	0, 00, 2, 01, 13, 16, 24, 27, 35, 68	32	9720

## Литература

1. Васильков, В.И. Опорные дуги и группы их автоморфизмов проективных плоскостях малых порядков: справочное пособие / В.И. Васильков, Ю.Н. Зверева, Г.В. Масленников. – Челябинск: Изд-во Челяб. гос. пед. ун-та, 2005. – 261 с.

2. Васильков, В.И. О строении проективных плоскостей порядка 9: дис. канд. физ-мат. наук / В.И. Васильков. – Екатеринбург, 1995. – 189 с.

3. Гонин, Е.Г. Метод поэтапных отождествлений / Е.Г. Гонин, Е.Е. Гонина // Известия научно-образовательного центра «Математика». – Вып. 3. – Пермь: ПГТУ, 2006. – С. 16–38.

*Поступила в редакцию 20 февраля 2014 г.*

---

*Bulletin of the South Ural State University  
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"  
2014, vol. 6, no. 2, pp. 77–79*

---

## FULL LIST OF COMPLETE $k$ -ARCS IN THE RIGHT NEARFIELD PLANE OF ORDER 9 FOR $k = 8, 9, 10$

**A.M. Sharafutdinova**<sup>1</sup>

There is a full list of complete  $k$ -arcs of the right nearfield plane of order 9 for  $k = 8, 9, 10$  up to isomorphism. The research method is based on a duality of the right nearfield plane and the left nearfield plane.

*Keywords: the right nearfield plane of order 9, the left nearfield plane of order 9, complete arcs.*

### References

1. Vasil'kov V.I., Zvereva Yu.N., Maslennikov G.V. *Opornye dugi i gruppy ikh avtomorfizmov proektivnykh ploskostyakh malykh poryadkov: spravochnoe posobie* (Support arcs and groups of their automorphism of projective planes of small orders: reference book). Chelyabinsk, Chelyabinskiy Gosudarstvennyy pedagogicheskiy universitet Publ., 2005. 261 p. (in Russ.).

2. Vasil'kov V.I. *O stroenii proektivnykh ploskostey poryadka 9: dis. kand. fiz-mat. nauk* (Projective plane of order 9 structure: thesis of Cand. Sc. (Physics and Mathematics)). Ekaterinburg, 1995. 189 p. (in Russ.).

3. Gonin E.G., Gonina E.E. *Izvestiya nauchno-obrazovatel'nogo tsentra «Matematika»*. Issue 3. Perm': PGTU, 2006. pp. 16–38. (in Russ.).

*Received 20 February 2014*

---

<sup>1</sup> Sharafutdinova Anna Mikhailovna is Post-graduate Student, Department of Mathematics and Mathematics Training Technique, Laboratory of Discrete Mathematics, Chelyabinsk State Pedagogical University.

E-mail: anna.sharafutdinova.88@mail.ru

## О РАДИОПРОЗРАЧНОСТИ ПЛАЗМЕННОЙ ОБОЛОЧКИ ГИПЕРЗВУКОВОГО ЛЕТАТЕЛЬНОГО АППАРАТА

И.А. Шевяков<sup>1</sup>

Рассматривается проблема обеспечения радиосвязи с аппаратами, движущимися в мезосфере с гиперзвуковой скоростью. Рассмотрены основные свойства плазменной среды, образующейся вокруг аппаратов при гиперзвуковом движении, влияющие на радиосвязь с ними.

*Ключевые слова:* мезосфера, ионизованный газ, плазменная оболочка, комплексная проводимость, волновой вектор, дисперсионное уравнение, радиопрозрачность, скин-слой.

### Введение

При движении аппаратов в верхней атмосфере со скоростями, превышающими скорость звука в три и более раз, образующаяся вокруг аппарата ударная волна начинает проявлять свойства ионизованного газа и плазмы. При этом возникают сбои радиообмена в диапазонах частот, используемых в системах спутниковой навигации, радиолокации и радиосвязи. Это делает проблематичным оперативное управление гиперзвуковым аппаратом и затрудняет установление причин аварий и отказов функционирования технических устройств. Проблема существует с первых дней пилотируемой космонавтики. Для разработки методов и аппаратуры, позволяющих обеспечить бесперебойную радиосвязь, необходимо изучить параметры затухания и фазы, которые показывают, как и с какими потерями радиоволны распространяются в исследуемой среде.

### Исследуемая среда

При вхождении в атмосферу спускаемых аппаратов или при движении гиперзвуковых аппаратов, вокруг них образуется плазменная оболочка (рис. 1), влияющая на радиосвязь [1].

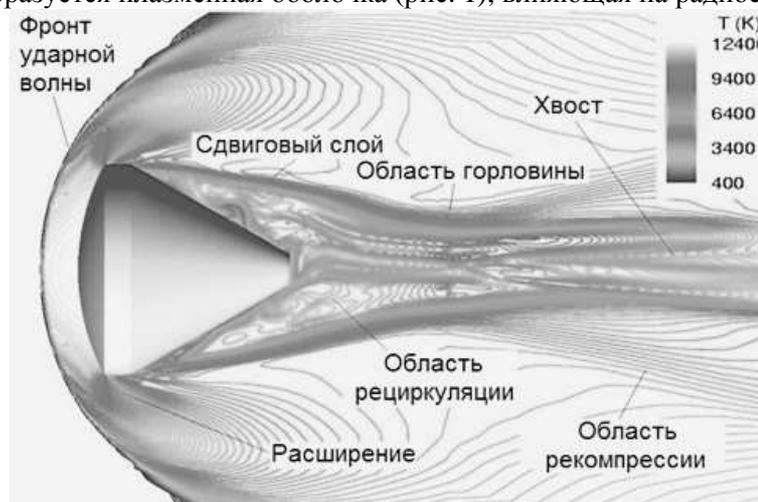


Рис.1. Структура плазменной оболочки объекта, движущегося в атмосфере с гиперзвуковой скоростью.

Толщина фронта ударной волны ( $\lambda_B$ ) имеет порядок длины свободного пробега молекул, что позволяет в расчётах фронт заменить поверхностью разрыва [2]. За фронтом газ образует по направлению  $Z$  слоистую структуру, но внутри слоёв газ относительно однородный. Т.н. адиабата Гюгоньо идёт круче, чем дозвуковая адиабата. Разогрев газа приводит к его ионизации и значительному повышению электропроводности.

<sup>1</sup> Шевяков Игорь Андреевич – аспирант, Южно-Уральский государственный университет.  
E-mail: regnlager@mail.ru

В термодинамически равновесной среде концентрация заряженных частиц определяется формулой Саха [3]. Для газа, состоящего из атомов одного сорта, уравнение Саха можно записать в виде [4]:

$$n_e = (2\pi m_e)^{3/4} (kT)^{1/4} P_o^{1/2} h^{-3/2} \exp\left(-\frac{\chi_r}{2kT}\right) \quad (1)$$

где  $m_e$  – масса электрона,  $\chi_r$  – энергия ионизации и,  $h$  – постоянная Планка,  $T$  – кинетическая температура,  $P_o$  – давление нейтрального газа.

Формула (1) применима при детальном равновесии в стационарном случае, а также и для смеси газов. При полной ионизации рассматриваемой компоненты в расчёте следует переходить к следующей компоненте с наименьшим потенциалом ионизации.

В рамках феноменологического подхода радиофизические свойства исследуемой среды описываются материальными уравнениями среды. Диэлектрические свойства среды характеризуются относительной диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon(\omega)$ , а проводящие свойства – проводимостью  $\sigma(\omega)$ . В переходной области применимы комплексные характеристики. Комплексная проницаемость  $\varepsilon$  в мнимой части содержит проводимость:  $\varepsilon = \varepsilon - i\sigma/(\varepsilon_0\omega)$ , что связано с наличием «токов потерь». Представим проводимость в комплексной форме:  $\sigma = \sigma_r - i\sigma_i$ , - здесь мнимая часть характеризует диэлектрические свойства среды.

Из материального уравнения и уравнения движения для электронов получаем действительную –  $\sigma_r$  и мнимую –  $\sigma_i$  компоненты комплексной проводимости:

$$\sigma_r = \frac{e^2 n_e}{m_e} \frac{v_e}{v_e^2 + \omega^2}; \quad \sigma_i = \frac{e^2 n_e}{m_e} \frac{\omega}{v_e^2 + \omega^2}. \quad (2)$$

### Распространение волны через исследуемую среду

Газовая плазма в отличие от столкновительного ионизованного газа отличается наличием коллективных электродинамических процессов. В частности возникают электронные плазменные колебания, но, развитию которых, препятствуют столкновения для электронов, как наиболее подвижных частиц. Распространение радиоволн связано с этими процессами.

Итак, основными радиофизическими характеристиками исследуемой среды являются частота столкновений электронов  $\nu_e$  и плазменная частота  $\omega_p$  (в системе СИ):

$$\nu_e = \frac{u_e}{\lambda} \quad \text{и} \quad \omega_p = \left(\frac{n_e e^2}{\varepsilon_0 m_e}\right)^{1/2}, \quad (3)$$

Среда становится радиопрозрачной: А) при  $\omega_p > 2\pi\nu_e$  имеем  $\omega_o = \omega_p$  или В) при  $2\pi\nu_e > \omega_p$  будет  $\omega_o = 2\pi\nu_e$ . Здесь  $\omega_o$  – критические частоты. Отражение наблюдается при частоте  $\omega$  ниже критических частот, если  $\omega_p > 2\pi\nu_e$ , а если  $2\pi\nu_e > \omega_p$ , то происходит поглощение на толщине скин-слоя  $\delta$  без отражения. В качестве примеров получим значение плазменной частоты  $\omega_p$  для оболочки спускаемого аппарата на высоте 75 км (скорость 5 км/с  $n_e \approx 10^{18} \text{ м}^{-3}$ ):  $\omega_p = 56,5 \cdot 10^9$  рад/с или  $\nu_p = 9$  ГГц [5]. Заметим, что переходная частотная область достаточно протяженная, в чём и заключается предмет предлагаемых исследований.

Считаем, что для длины волны  $\lambda$  выполняются условие:  $\lambda > \delta$ , где  $\delta$  – радиус Дебая. Распространение СВЧ поля в ионизованном газе описывается уравнениями макроскопической электродинамики [6]. Для фазового параметра –  $\beta$  и параметра затухания –  $\alpha$  известны частотные зависимости:

$$\beta^2 \frac{c^2}{\omega^2} = \frac{1}{2} \left[ \left[ \left(1 - \frac{\omega_p^2}{v_e^2 + \omega^2}\right)^2 + \frac{v_e^2}{\omega^2} \left(\frac{\omega_p^2}{v_e^2 + \omega^2}\right)^2 \right]^{1/2} + \left(1 - \frac{\omega_p^2}{v_e^2 + \omega^2}\right) \right] \quad (4)$$

$$\alpha^2 \frac{c^2}{\omega^2} = \frac{1}{2} \left[ \left[ \left(1 - \frac{\omega_p^2}{v_e^2 + \omega^2}\right)^2 + \frac{v_e^2}{\omega^2} \left(\frac{\omega_p^2}{v_e^2 + \omega^2}\right)^2 \right]^{1/2} - \left(1 - \frac{\omega_p^2}{v_e^2 + \omega^2}\right) \right] \quad (5)$$

## Краткие сообщения

Представленные уравнения позволяют построить зависимости от частоты для  $\alpha$  и  $\beta$  падающего радиосигнала  $\omega = 2\pi f$ , например, при значении  $f_p = 9$  ГГц [7]. Графики этих зависимостей приведены на рис. 2.

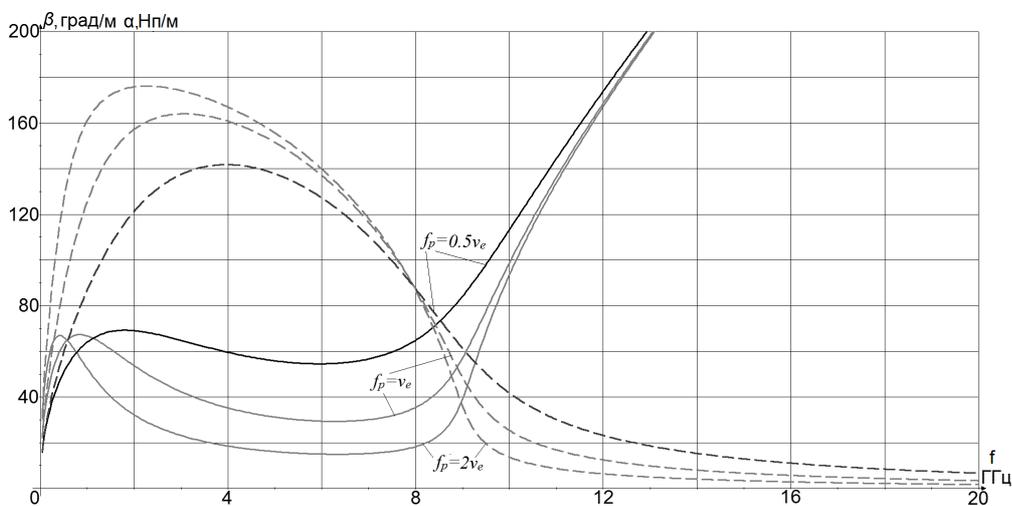


Рис. 2. Зависимости  $\beta$  и  $\alpha$  (пунктир) от частоты радиосигнала

Анализируя полученные зависимости, можно отметить, что когда частота столкновений электронов незначительна, среда прозрачна для радиоволн только при значении их частоты больше плазменной, что выражается в обращении фазовой постоянной в ноль при значениях плазменной частоты меньше частоты радиосигнала. При этом значение затухания начинает резко возрастать. Это подтверждает то, что в идеальной плазме частота радиопрозрачности или критическая частота, значение которой определяет нижнюю границу для радиоволн, которые могут распространяться в данной среде, равняется плазменной частоте.

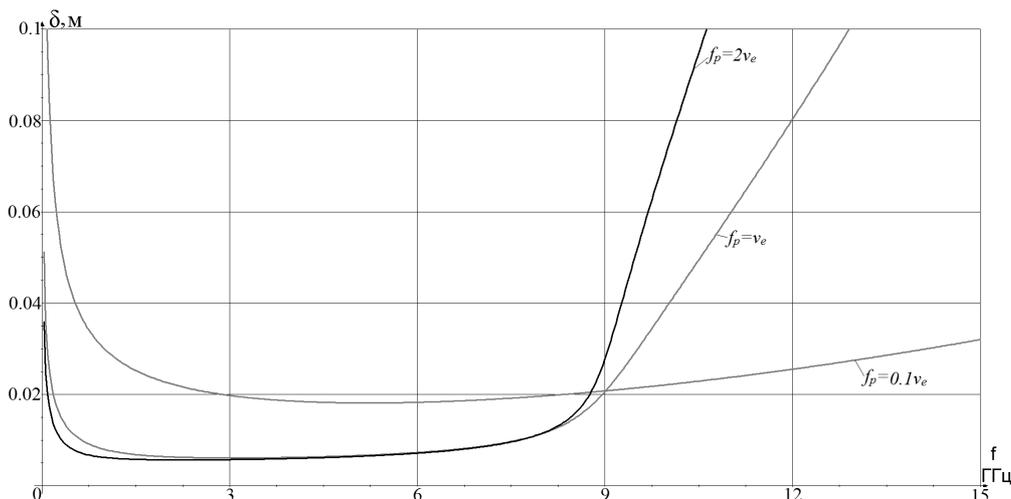
При увеличении значения частоты столкновений электронов фазовая постоянная уже не становится равной нулю при плазменной частоте, превышающей частоту радиосигнала, а значение постоянной затухания возрастает с меньшей скоростью, чем в чисто плазменном случае. Отсюда можно сделать вывод, что частота столкновений электронов влияет на критическую частоту для рассматриваемой среды, которая уже не будет равняться плазменной частоте.

Для оценки изменения глубины проникновения электромагнитной волны в среду воспользуемся определением глубины скин-слоя  $\delta$ , как обратной величины от постоянной затухания [6]:

$$\delta \frac{\omega}{c} = \left( \frac{1}{2} \left[ \left( 1 - \frac{\omega_p^2}{v_e^2 + \omega^2} \right)^2 + \frac{v_e^2}{\omega^2} \left( \frac{\omega_p^2}{v_e^2 + \omega^2} \right)^2 \right]^{1/2} - \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\omega_p^2}{v_e^2 + \omega^2} \right) \right)^{-1/2}. \quad (6)$$

Графики, построенные по формуле (6), приведены на рис. 3.

Несложно увидеть, что толщина скин-слоя характерно увеличивается с увеличением частоты радиосигнала в области  $f_p = f$ . Однако такое резкое увеличение толщины скин-слоя характерно лишь при незначительных величинах частоты столкновений электронов (случай 1). При больших значениях  $v_e$  увеличение толщины скин-слоя происходит гораздо медленнее и его значение остаётся довольно высоким во всём диапазоне частот. Это так же, как и в случае с графиками постоянных  $\alpha$  и  $\beta$ , показывает, что частота столкновений электронов значительно влияет на характер распространения электромагнитной волны в столкновительной ионизированной среде. Необходимо заметить, что на низких частотах (здесь меньше 2 ГГц) зависимости на рис. 3 теряют физический смысл, т.к. длины волн превышают расчётные значения скин-слоя.

Рис. 3. Зависимости  $\delta$  от частоты радиосигнала

### Выводы

В работе были рассмотрены свойства среды, влияющие на радиосвязь с гиперзвуковыми аппаратами. Получены зависимости для трёх важных характеристик плазменной среды - постоянной фазы и затухания, а также толщины скин-слоя. Показано, что при рассмотрении особенностей распространения электромагнитной волны в столкновительной ионизированной среде значительное влияние на радиопрозрачность оказывает частота столкновений электронов и, следовательно, частота радиопрозрачности уже не будет определяться только значением плазменной частоты.

### Литература

1. Wolverton, M. Piercing the Plasma: Ideas to Beat the Communications Blackout of Reentry / M. Wolverton // Scientific American. – New York: Scientific American. 2009. – № 12. – С. 28–29.
2. Чёрный, Г.Г. Газовая динамика / Г.Г. Чёрный. – М: Наука, 1983. – 484 с.
3. Bradt, H.V. Astrophysics Processes / H.V. Bradt. – Cambridge University Press, 2008. – 536 с.
4. Шевяков, И.А. Радиофизические свойства столкновительной плазмы газового разряда // И.А. Шевяков, В.И. Тамбовцев, А.А. Кучуркин // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Т. 5, № 1. – С. 100–106.
5. Клеймон, Дж. След объекта, входящего в атмосферу / Дж. Клеймон // Ракетная техника и космонавтика. – 1964. – Вып. 4.
6. Голант, В.Е. СВЧ методы исследования плазмы / В.Е. Голант. – М.: Наука, 1968. – 328 с.
7. Шевяков, И.А. О радиопрозрачности естественного и возмущённого газа слоя D основания ионосферы / И.А. Шевяков, В.И. Тамбовцев, А.А. Кучуркин // Труды XI международной конференции «Физика и технические приложения волновых процессов». – Екатеринбург: УрФУ, 2012. – С. 297–299.

Поступила в редакцию 23 сентября 2013 г.

### RADIO TRANSPARENCY OF PLASMA SHELL FOR HYPERSONIC AIRCRAFT

*I.A. Shevyakov*<sup>1</sup>

This paper considers the problem of radio communication with vehicles, moving in mesosphere at hypersonic speed. Basic properties of plasma medium formed around vehicles at hypersonic motion and effecting radio communication with them are considered.

*Keywords: mesosphere, ionized gas, plasma shell, complex conductivity, wave vector, dispersion equation, radio transparency, skin layer.*

#### References

1. Wolverton M. Piercing the Plasma: Ideas to Beat the Communications Blackout of Reentry. *Scientific American*. New York: Scientific American. 2009. no. 12. pp. 28–29.
2. Chyernyy G.G. *Gazovaya dinamika* (Gas dynamics). Moscow, Nauka Publ., 1983. 484 p. (in Russ.).
3. Bradt H.V. *Astrophysics Processes*. Cambridge University Press, 2008. 536 p.
4. Shevyakov I.A., Tambovtsev V.I., Kuchurkin A.A. Radiofizicheskie svoystva stolknovitel'noy plazmy gazovogo razryada (Radio physical properties of collisional plasma in gas discharge). *Vestnik YuUrGU. Seriya «Matematika. Mekhanika. Fizika»*. 2013. Vol. 5, no. 1. pp. 100–106. (in Russ.).
5. Kleymon Dzh. *Raketnaya tekhnika i kosmonavtika*. 1964. Issue 4. (in Russ.).
6. Golant V.E. *SVCh metody issledovaniya plazmy* (Super high frequency methods of plasma analysis). Moscow, Nauka Publ., 1968. 328 p.
7. Shevyakov I.A., Tambovtsev V.I., Kuchurkin A.A. O radioprozrachnosti estestvennogo i voz-mushchyennogo gaza sloya D osnovaniya ionosfery (About radiotransparency natural gas and perturbed D base layer of the ionosphere). *Trudy KhI mezhdunarodnoy konferentsii "Fizika i tekhnicheskie prilozheniya volnovykh protsessov"* (Proceedings of the XI International Conference "Physics and engineering applications of wave processes"). Ekaterinburg, UrFU. 2012. pp. 297–299. (in Russ.).

*Received 23 September 2013*

---

<sup>1</sup> Shevyakov Igor Andreevich is Post-graduate Student, South Ural State University.

## СВЕДЕНИЯ О ЖУРНАЛЕ

Серия основана в 2009 году.

Свидетельство о регистрации ПИ № ФС 77-57362 выдано 24 марта 2014 г. Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

Журнал включен в Реферативный журнал и Базы данных ВИНИТИ. Сведения о журнале ежегодно публикуются в международной справочной системе по периодическим и продолжающимся изданиям «Ulrich's Periodicals Directory».

Решением Президиума Высшей аттестационной комиссии Министерства образования и науки Российской Федерации журнал включен в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук».

Подписной индекс 29211 в объединенном каталоге «Пресса России».

Периодичность выхода – 4 номера в год.

## ТРЕБОВАНИЯ К ПУБЛИКАЦИИ СТАТЬИ

1. Публикуются оригинальные работы, содержащие существенные научные результаты, не опубликованные в других изданиях, прошедшие этап научной экспертизы и соответствующие требованиям к подготовке рукописей.

2. В редакцию предоставляется электронная (документ MS Word 2003) версия работы объемом не более 6 страниц, экспертное заключение о возможности опубликования работы в открытой печати, сведения об авторах (Ф.И.О., место работы, звание и должность для всех авторов работы), контактная информация ответственного за подготовку рукописи.

3. Структура статьи: УДК, название (не более 12–15 слов), список авторов, аннотация (не более 500 знаков с пробелами), список ключевых слов, текст работы, литература (в порядке цитирования, в скобках, если это возможно, дается ссылка на оригинал переводной книги или статьи из журнала, переводящегося на английский язык). После текста работы следует название, аннотация (или реферат статьи объемом до 1800 знаков с пробелами), список ключевых слов и сведения об авторах на английском языке.

4. Параметры набора. Поля: зеркальные, верхнее – 23, нижнее – 23, внутри – 22, снаружи – 25 мм. Шрифт – Times New Roman, масштаб 100 %, интервал – обычный, без смещения и анимации, 11 pt. Отступ красной строки 0,7 см, интервал между абзацами 0 pt, межстрочный интервал – одинарный.

5. Формулы. Стиль математический (цифры, функции и текст – прямой шрифт, переменные – курсив), основной шрифт – Times New Roman 11 pt, показатели степени 71 % и 58 %. Выключенные формулы должны быть выровнены по центру.

6. Рисунки все черно-белые. Если рисунок создан не средствами MS Office, то желательно предоставить рисунки и в виде отдельных файлов.

7. Адрес редакции журнала «Вестник ЮУрГУ» серии «Математика. Механика. Физика»:

Россия 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76, Южно-Уральский государственный университет, физический факультет, кафедра ОиТФ, ответственному редактору профессору Мирзоеву Александру Аминулаевичу [Prof. Mirzoev Aleksander Aminulaevich, General and Theoretical Physics Department, SUSU, 76, Lenin prospekt, Chelyabinsk, Russia, 454080].

8. Адрес электронной почты: [vestnik@physics.susu.ac.ru](mailto:vestnik@physics.susu.ac.ru)

9. Полную версию правил подготовки рукописей и пример оформления можно загрузить с сайта ЮУрГУ (<http://www.susu.ac.ru>) следуя ссылкам: «Наука», «Вестник ЮУрГУ», «Серии».

10. Журнал распространяется по подписке. Подписной индекс журнала «Вестник ЮУрГУ», серия «Математика. Механика. Физика»: 29211, каталог «Пресса России». Интернет-каталог агентства «Книга-Сервис», подписной индекс: E29211. Электронная версия: см. [www.elibrary.ru](http://www.elibrary.ru).

11. Плата с аспирантов за публикацию не взимается.

Редактор А.Ю. Федерякин

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 30.04.2014. Формат 60×84 1/8. Печать цифровая.

Усл. печ. л. 10,23. Тираж 500 экз. Заказ 113/260.

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ. 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.