

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, г. Блумингтон, США),
д.ф.-м.н., Ph. D., профессор, **Штраус В.А.** (Университет Симона Боливара, г. Каракас, Венесуэла),
Ph. D., профессор **Ким Кишик** (Kim Kisik, ИНА-Университет, г. Инчон, Корея),
Ph. D., профессор **Ким Джейван** (Kim Jaewan, Корейский институт передовых исследований KIAS, г. Сеул, Корея),
Ph. D., ассистент-профессор **Пузырев Е.С.** (Университет Вандербильта, г. Нэшвилл, США)

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, Bloomington, 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

АЛИЕВ Р.А. Обратная задача определения коэффициента в эллиптическом уравнении.....	5
ДМИТРИЕВ А.В., ЕРШОВ А.А. Анализ диссипации энергии в поверхностном слое для контактного электрического сопротивления.....	14
ЕРШОВА А.А., СИДИКОВА А.И. Оценка погрешности метода, основанного на обобщенном принципе невязки, для задачи восстановления спектральной плотности кристаллов.....	25
КАРАЧИК В.В. Задачи Коши и Гурса для уравнения 3-го порядка.....	31

Физика

ВЯТКИН Г.П., МОРОЗОВ С.И. Моделирование из первых принципов сегрегации атомов железа на поверхности (111) никеля.....	44
ПРОКУДИНА Л.А. Влияние внешнего воздействия на развитие возмущений в орегонаторе с диффузией.....	50
РИДНЫЙ Я.М., МИРЗОЕВ А.А., МИРЗАЕВ Д.А. Примеси углерода в парамагнитном ГЦК-железе: <i>ab initio</i> моделирование энергетических параметров.....	56
СОКОЛОВА Н.М. Энергоёмкость механического диспергирования.....	64

Краткие сообщения

ГУЛЯЩИХ И.А. Задача Неймана для полигармонического уравнения в единичном шаре.....	70
ХАЙРИСЛАМОВ К.З. Установившееся движение жидкости со степенным законом вязкости между вращающимися цилиндрами.....	73

CONTENTS

Mathematics

ALIYEV R.A. Inverse Problem of Determination of Coefficient in the Elliptic Equation	5
DMITRIEV A.V., ERSHOV A.A. The Analysis of Energy Absorption in a Blanket for Contact Electric Resistance.....	14
ERSHOVA A.A., SIDIKOVA A.I. Uncertainty Estimation of the Method Based on Generalized Residual Principle for the Restore Task of the Spectral Density of Crystals.....	25
KARACHIK V.V. Cauchy and Goursat Problems for Differential Equation of Third Order.....	31

Physics

VIATKIN G.P., MOROZOV S.I. Ab Initio Modeling of Segregation of Iron Atoms on the (111) Nickel Surface.....	44
PROKUDINA L.A. Effects of External Influences on the Development of Disturbances in the Oregonator with Diffusion.....	50
RIDNYI Ya.M., MIRZOEV A.A., MIRZAEV D.A. Carbon Impurities in Paramagnetic FCC Iron: <i>Ab Initio</i> Simulation of Energy Parameters	56
SOKOLOVA N.M. Energy Intensive Mechanical Dispersion	64

Short communications

GULYASHCHIKH I.A. Neumann Problem for Polyharmonic Equation in the Unit Ball	70
KHAYRISLAMOV K.Z. A Steady-State Flow of a Power-Law Fluid between Rotating Coaxial Cylinders.....	73

ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА В ЭЛЛИПТИЧЕСКОМ УРАВНЕНИИ

Р.А. Алиев¹

Рассмотрена обратная задача определения коэффициента в эллиптическом уравнении в прямоугольнике. Задачи идентификации неизвестных плотностей источников и коэффициентов приводят к подобным обратным задачам. Использование метода оценок типа Карлемана доказывается теорема единственности поставленной обратной задачи.

Ключевые слова: обратная задача; эллиптическое уравнение.

Обратные задачи для линейных и нелинейных уравнений эллиптического типа рассмотрены в работах [1–9]. В работах [2, 10] используя метод оценок типа Карлемана [11–12] получена теорема единственности для широкого класса обратных задач. В работе с использованием этой идеи получена теорема единственности для уравнения эллиптического типа.

Рассмотрим задачу об определении $\{q(u), u(x, y), \phi_2(y)\}$ из следующих условий

$$-\Delta u + u = h_1(x, y)q(u) + h_2(x, y), \quad (x, y) \in D, \quad (1)$$

$$u_x(0, y) = \phi_1(y), u_x(l_1, y) = \phi_2(y), \quad 0 \leq y \leq l_2, \quad (2)$$

$$u(x, 0) = \varphi_1(x), u_y(x, l_2) = \varphi_2(x), \quad 0 \leq x \leq l_1, \quad (3)$$

$$u(d_0, y) = \chi(y), \quad 0 < d_0 < l_1, \quad 0 \leq y \leq l_2, \quad (4)$$

$$u_y|_{y=0} = g(x), \quad 0 \leq x \leq l_1, \quad (5)$$

удовлетворяющих условиям $\varphi_{1x}(0) = \phi_1(0), \varphi_{1x}(l_1) = \phi_2(0), \varphi_{2x}(0) = \phi_1(l_2), \varphi_{2x}(l_1) = \phi_2(l_2), \phi_{1y}(0) = g_x(0), \phi_{2y}(0) = g_x(l_1), \varphi_1(d_0) = \chi(0), \varphi_2(d_0) = \chi(l_2)$. Здесь $D = \{(x, y) | 0 < x < l_1, 0 < y < l_2\}$, $h_i(x, y), \varphi_i(x), \quad i = 1, 2, \phi_1(y), \chi(y), g(x)$ – известные функции, $h_i(x, y) \in C^{3+\alpha}(\bar{D}), i = 1, 2, \varphi_1(x) \in C^{4+\alpha}[0, l_1], \varphi_2(x) \in C^{3+\alpha}[0, l_1], \phi_1(y) \in C^{3+\alpha}[0, l_2], \chi(y) \in C^{4+\alpha}[0, l_2], g(x) \in C^{3+\alpha}[0, l_1], R_1 = \varphi_1(0), R_2 = \chi(l_2), 0 < \alpha < 1$.

Определение. Функции $\{q(u), u(x, y), \phi_2(y)\}$ назовем решением задачи (1)–(5), если функции $q(u), \phi_2(y)$ принадлежат соответственно классам $\mathcal{M}[R_1, R_2]$ и $\mathcal{M}[0, l_2]$, в которых $0 < \mu_1 \leq q(u) \leq \mu_2, \nu_1 \leq q'(u) \leq \nu_2 < 0, q(u) \in C^2[R_1, R_2], \phi_2(y) \geq \mu > 0, \phi_{2y}(y) \geq 0, \phi_2(y) \in C^3[0, l_2], u(x, y) \in C^4(\bar{D})$ и удовлетворяют соотношениям (1)–(5).

Обозначим через $\alpha_0 = \varphi_1(0), \alpha_1 = \varphi_1(l_1), \alpha_2 = \chi(l_2)$. Пусть $\alpha_1 < \alpha_2$. Для каждого $z \in [\alpha_1, \alpha_2]$ через $s_z(x)$ обозначим функцию $y = s_z(x)$, являющуюся решением уравнения $u(x, s_z(x)) = z, (x, s_z(x)) \in \bar{D}$. Введем обозначение: $D_z = \{(x, y) \in D, u(x, y) < z\}$. Для каждого $z \in [\alpha_1, \alpha_2]$ обозначим $u(x, s_z(d_0)) = f_z(x)$. Очевидно, что $f_z(d_0) = z$. Пусть $\chi'(y) > 0$ и $\gamma(z)$ обратная функция $\chi(y)$, тогда $\gamma(z) = s_z(d_0)$.

Теорема 1. Пусть $a_{ij}(x, y) \in C^2(\bar{D}), \sum_{i,j=1}^2 a_{ij} \xi_i \xi_j \geq \lambda_1 \sum_{i=1}^2 \xi_i^2, \lambda_1 > 0$ и функция $u(x, y) \in C^2(D) \cap C(\bar{D})$ и удовлетворяет в области D условию

$$a_{11}(x, y)u_{xx} + 2a_{12}(x, y)u_{xy} + a_{22}(x, y)u_{yy} = b_1(x, y)u_x + b_2(x, y)u_y + b_3(x, y)u,$$

¹ Алиев Рамиз Аташ оглы – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра информатики и информационных систем, Азербайджанский университет кооперации, г. Баку, Азербайджан.

E-mail: ramizaliyev3@rambler.ru

где $b_i(x, y), i = 1, 2, 3$ – ограниченные функции на \bar{D} . Если в области D

$$\begin{aligned} |a_{11}u_{xx} + 2a_{12}u_{xy} + a_{22}u_{yy}| &\leq M \left[|u_x| + |u_y| + |u| \right], \quad M > 0, \quad (x, y) \in D, \\ u(l_1, y) = 0, u_x(l_1, y) &= 0, \quad y \in [0, l_2], \end{aligned}$$

тогда $u(x, y) \equiv 0$ в \bar{D} [11, с. 99].

Лемма 1. Пусть решение задачи (1)–(5) существует и выполнены следующие условия

$$\begin{aligned} h_1(x, y) > 0, h_{i_x}(x, y) > 0, h_{i_y}(x, y) > 0, i = 1, 2, \varphi_{1x}(x) \geq \mu, \\ \varphi_2(x) \geq \mu, \phi_1(y) \geq \mu, g(x) \geq \mu, \phi_{1y}(y) \leq 0. \end{aligned}$$

Тогда верны следующие оценки

$$u_x(x, y), u_y(x, y) \geq \lambda_2 > 0, \tag{6}$$

где

$$\begin{aligned} \mu &= \min \left\{ \min_x g(x), \min_x \varphi_{1x}(x), \min_x \varphi_2(x), \min_y \phi_1(y) \right\}, \\ \lambda_2 &= \min \left\{ \mu, \min_{\bar{D}} \frac{\mu_1 h_{1x}(x, y) + h_{2x}(x, y)}{1 - \nu_1 h_1(x, y)}, \min_{\bar{D}} \frac{\mu_1 h_{1y}(x, y) + h_{2y}(x, y)}{1 - \nu_1 h_1(x, y)} \right\}. \end{aligned}$$

Доказательство. Задачу (1)–(3) продифференцируем соответственно по x и y , учитывая условия леммы и используя принцип максимума, получим оценки (6). Лемма доказана.

В силу (6) функция $s_z(x)$ корректно определена для всех x , таких, что $u(x, l_2) \geq z$ и в частности, для всех $x \in [d_0, l_1]$.

Теорема. Пусть $\alpha_1 < \alpha_2$ и функция $q(z)$ известна при $z \in (\alpha_0, \alpha_1)$. Тогда найдется не более одной вектор-функции $(u, q, \phi_2(y)) \in C^4(\bar{D}_{\alpha_2}) \times \mathcal{M}[\alpha_0, \alpha_2] \times \mathcal{M}[0, s_{\alpha_2}(d_0)]$ удовлетворяющей (1)–(5), (6) и такой, что $u(x, y) \in C^4(\bar{D})$.

Сначала докажем несколько лемм.

Лемма 2. Пусть числа $c \in [\alpha_1, \alpha_2], q(z)$ известны при $z \in [\alpha_0, c]$. Тогда функция $u(x, y)$ в области D_c определяется единственным образом.

Доказательство. В силу (6) $s_c(d_0) \in (0, l_2), \chi(s_c(d_0)) = c$ и число $s_c(d_0)$ известно, так как функция χ известна. Обозначим $G_{\alpha_1} = (0, d_0) \times (0, s_{\alpha_1}(d_0)), G_c = (0, d_0) \times (s_{\alpha_1}(d_0), s_c(d_0))$ при $c > \alpha_1$ и $G = (0, d_0) \times (0, s_c(d_0))$. Очевидно, что $G = G_{\alpha_1} \cup G_c$.

Введем функцию

$$L(x, y) = \begin{cases} q(\varphi_1(x)), & (x, y) \in G_{\alpha_1}, \\ q(\chi(y)), & (x, y) \in G_c. \end{cases}$$

В области $G = (0, d_0) \times (0, s_c(d_0))$ рассмотрим обратную задачу об определении функции $\{f(x), u(x, y)\}$ из следующих условий

$$-\Delta u + u = h_1(x, y)L(x, y) + h_2(x, y), \quad (x, y) \in G, \tag{7}$$

$$u_x(0, y) = \phi_1(y), u(d_0, y) = \chi(y), \quad y \in (0, s_c(d_0)), \tag{8}$$

$$u(x, 0) = \varphi_1(x), u(x, s_c(d_0)) = f_c(x), \quad x \in (0, d_0), \tag{9}$$

$$u_y|_{y=0} = g(x), \quad x \in (0, d_0), \tag{10}$$

удовлетворяющих условиям $\varphi_{1x}(0) = \phi_1(0), \varphi_1(d_0) = \chi(0), f_{cx}(0) = \phi_1(s_c(d_0)), f_c(d_0) = \chi(s_c(d_0)), \chi_y(0) = g(d_0), \phi_{1y}(0) = g_x(0)$.

Предположим, что существуют два решения: $\{u_1(x, y), f_{1c}(x)\}$ и $\{u_2(x, y), f_{2c}(x)\}$. Обозначим $\tilde{u}(x, y) = u_2(x, y) - u_1(x, y), \tilde{f}_c(x) = f_{2c}(x) - f_{1c}(x)$. Тогда получим

$$\Delta \tilde{u} + \tilde{u} = 0, \tag{11}$$

$$\tilde{u}_x(0, y) = 0, \quad \tilde{u}(d_0, y) = 0, \tag{12}$$

$$\tilde{u}(x, 0) = 0, \quad \tilde{u}(x, s_c(d_0)) = \tilde{f}_c(x) \quad (13)$$

$$u_y \Big|_{y=0} = 0. \quad (14)$$

С помощью метода разделения переменных решение задачи (11)–(13) ищем, как обычно, в виде ряда

$$\tilde{u}(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \{ \text{sh}[(\frac{2n+1}{2d_0}\pi)^2 + 1]^{1/2} y \} \cos \frac{2n+1}{2d_0} \pi x.$$

Условие при $y = d \equiv s_c(d_0)$ дает

$$A_n = \frac{\tilde{\rho}_n}{\text{sh}[(\frac{2n+1}{2d_0}\pi)^2 + 1]^{1/2} d},$$

где

$$\tilde{\rho}_n = \frac{2}{d_0} \int_0^{d_0} \tilde{f}_c(\xi) \cos \frac{2n+1}{2d_0} \pi \xi d \xi.$$

Тогда получим

$$\tilde{u}(x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{\rho}_n \frac{\text{sh}[(\frac{2n+1}{2d_0}\pi)^2 + 1]^{1/2} y}{\text{sh}[(\frac{2n+1}{2d_0}\pi)^2 + 1]^{1/2} d} \cos \frac{2n+1}{2d_0} \pi x.$$

Отсюда, учитывая условия (14), получим

$$\sum_{n=1}^{\infty} [(\frac{2n+1}{2d_0}\pi)^2 + 1]^{1/2} \frac{\tilde{\rho}_n}{\text{sh}[(\frac{2n+1}{2d_0}\pi)^2 + 1]^{1/2} d} \cos \frac{2n+1}{2d_0} \pi x = 0.$$

В силу единственности разложения $\rho_n = 0$ для любого n , так как система $\{\cos \frac{2n+1}{2d_0} \pi x\}$ замкнута, $\tilde{f}_c(x) = 0$. Значит решение единственно. Лемма доказана.

Сделаем преобразование годографа в области $[d_0, l_1] \times [0, l_2]$ по формулам $u(\omega(z, y), y) = z$. Тогда вместо (1)–(4) получим

$$\left(\frac{1}{\omega_z^3} + \frac{\omega_y^2}{\omega_z^3}\right) \omega_{zz} - 2 \frac{\omega_y}{\omega_z^2} \omega_{zy} + \frac{1}{\omega_z} \omega_{yy} = q(z) h_1(\omega, y) + h_2(\omega, y), \quad \varphi_1(d_0) < z < \chi(l_2), 0 < y < \gamma(z), \quad (15)$$

$$\omega(z, \gamma(z)) = d_0. \quad (16)$$

При условии (6) уравнение (15) сохраняет условие равномерной эллиптичности. Обозначим $D_c(d_0) = D_c \cap \{y \in (0, \gamma(c))\}$. Рассмотрим теперь область $H_c = \{(z, y) : \varphi_1(d_0) < z < c, 0 < y < \gamma(z)\}$ – образ области $D_c(d_0) \setminus G$ при преобразовании годографа. Отрезок прямой $\{x = d_0, 0 < y < \gamma(z)\}$ перешел при преобразовании годографа в кривую $\{y = \gamma(z), \varphi_1(d_0) < z < c\}$. Предположим, что существуют два решения $\omega_1(z, y)$ и $\omega_2(z, y)$ задачи (15)–(16). Обозначим $\tilde{\omega}(z, y) = \omega_2(z, y) - \omega_1(z, y)$. Так как функции $\tilde{u}(d_0, y), \tilde{u}_x(d_0, y)$ известны при $y \in (0, \gamma(z))$, то известны и функции $\tilde{\omega}(z, \gamma(z)), \tilde{\omega}_z(z, \gamma(z))$. Действительно, учитывая что $\omega_z(z, \gamma(z)) = \frac{1}{u_x(d_0, \gamma(z))}$, получим

$\tilde{\omega}(z, \gamma(z)) = \tilde{\omega}_z(z, \gamma(z)) = 0$. Кроме того, функция $q(z)$ также известна в D_c . Тогда $\tilde{\omega}(z, y)$ в D_c определяется единственным образом. Действительно, для $\tilde{\omega}(z, y)$ получим следующую задачу

$$k_1 \tilde{\omega}_{zz} + 2k_2 \tilde{\omega}_{zy} + k_3 \tilde{\omega}_{yy} + k_4 \tilde{\omega}_z + k_5 \tilde{\omega}_y + k_6 \tilde{\omega} = 0, \quad \varphi_1(d_0) < z < c, 0 < y < \gamma(z), \quad (17)$$

$$\tilde{\omega}(z, \gamma(z)) = \tilde{\omega}_z(z, \gamma(z)) = 0, \quad (18)$$

где

$$k_1(z, y) = \frac{1}{\omega_{2z}^3} (1 + \omega_{2y}^2), k_2(z, y) = -\frac{1}{\omega_{2z}^2} \omega_{2y}, k_3(z, y) = \frac{1}{\omega_{2z}}, k_4(z, y) = \frac{k_3}{\omega_{1z}} [-\omega_{1yy} - (1 + \omega_{1y}^2)(k_3^2 + \frac{1}{\omega_{1z}} k_3 +$$

$$+\frac{1}{\omega_{1z}^2})\omega_{1zz} + 2\omega_{1y}(k_1 + \frac{1}{\omega_{1z}})\omega_{1zy}], k_5(z, y) = k_3^2[k_3(\omega_{1y} + \omega_{2y})\omega_{1zz} - 2\omega_{1zy}], k_6(z, y) = -q(z)h_{1\omega} - h_{2\omega}.$$

Из (17)–(18) получим

$$|k_1\tilde{\omega}_{zz} + 2k_2\tilde{\omega}_{zy} + k_3\tilde{\omega}_{yy}| \leq M[|\tilde{\omega}_z| + |\tilde{\omega}_y| + |\tilde{\omega}|], (z, y) \in H_c, \quad (19)$$

$$\tilde{\omega}(z, \gamma(z)) = \tilde{\omega}_z(z, \gamma(z)) = 0. \quad (20)$$

Отсюда по теореме 1 нетрудно вывести, что $\tilde{\omega}(z, y) \equiv 0, (z, y) \in H_c$. В силу взаимной однозначности преобразования функции $u(x, y)$ определяется единственным образом в D_c . Лемма доказана. Из леммы 2 очевидно вытекает

Лемма 3. Функция $u(x, y)$ в области D_{α_1} определяется единственным образом. В частности, функция $u(x, y)$ определяется единственным образом в области $\{(x, y) : |x - d_0| < \sigma, y \in (0, s_{\alpha_1}(x))\}$ для некоторого малого $\sigma > 0$.

Пусть $\varepsilon > 0$ – достаточно малое число. Обозначим

$$G_\varepsilon = \{(z, y) | z \in (\alpha_1 - \varepsilon, \alpha_1), |y - \gamma(z)| < \varepsilon\}, S_\varepsilon = \{(z, y) | z \in (\alpha_1, \alpha_1 + \varepsilon), |y - \gamma(z)| < \varepsilon\}.$$

Из леммы 2 вытекает, что функция $u(x, y)$ определяется единственным образом в G_ε . Предположим, что есть два решения задачи (1)–(5). Тогда имеются две функции $\omega_i(z, y), q_i(z), i = 1, 2$. Пусть $\tilde{\omega}(z, y) = \omega_2(z, y) - \omega_1(z, y), \tilde{q}(z) = q_2(z) - q_1(z)$. Используя (14)–(15) и леммы 3 для функции $\{\tilde{\omega}(z, y), \tilde{q}(z)\}$, имеем

$$k_1\tilde{\omega}_{zz} + 2k_2\tilde{\omega}_{zy} + k_3\tilde{\omega}_{yy} + k_4\tilde{\omega}_z + k_5\tilde{\omega}_y + k_6\tilde{\omega} = h_1(\omega_1, y)\tilde{q}(z), (z, y) \in S_\varepsilon, \quad (21)$$

$$\tilde{\omega}(z, \gamma(z)) = 0, \quad (22)$$

$$\tilde{\omega}(\alpha_1, y) = \tilde{\omega}_z(\alpha_1, y) = 0, (z, y) \in S_\varepsilon. \quad (23)$$

Заменим переменные в (21)–(23), положив $z' = z - \alpha, y' = y$.

Для краткости записи сохраним прежние обозначения для новых переменных и функций. При замене функция $\gamma(z)$ перейдет в функцию вида $\beta(z) = \gamma(\alpha_1 + z), |\beta'(z)| \leq K_1, K_1 > 0$.

Обозначим $S'_\varepsilon = \{(z, y) | z \in (0, \varepsilon), |y - \beta(z)| < \varepsilon\}$. Тогда получим

$$k_1\tilde{\omega}_{zz} + 2k_2\tilde{\omega}_{zy} + k_3\tilde{\omega}_{yy} + k_4\tilde{\omega}_z + k_5\tilde{\omega}_y + k_6\tilde{\omega} = h_1(\omega_1, y)\tilde{q}(z), (z, y) \in S'_\varepsilon, \quad (24)$$

$$\tilde{\omega}(z, \beta(z)) = 0, \quad (25)$$

$$\tilde{\omega}(0, y) = \tilde{\omega}_z(0, y) = 0. \quad (26)$$

Для $\tilde{q}(z)$ из (24) получим

$$q(z) = Q(z, y)(\tilde{\omega}_{zz} + 2\bar{k}_2\tilde{\omega}_{zy} + \bar{k}_3\tilde{\omega}_{yy}) + a_1\tilde{\omega}_z + a_2\tilde{\omega}_y + a_3\tilde{\omega}, \quad (27)$$

$$\tilde{\omega}(0, y) = \tilde{\omega}_z(0, y) = 0, \quad (28)$$

где

$$Q(z, y) = -\frac{1}{h_1}, \bar{k}_2(z, y) = \frac{k_2}{k_1}, \bar{k}_3(z, y) = \frac{k_3}{k_1}, a_1(z, y) = -\frac{1}{h_1}k_4, a_2(z, y) = -\frac{1}{h_1}k_5, a_3(z, y) = \frac{q_2}{h_1}h_{1\omega}.$$

Продифференцируем равенство (27) по y . Слева получим нуль. Введем обозначения

$$P(z, y) = \tilde{\omega}_y + [\frac{\partial}{\partial y}(\ln|Q|)]\tilde{\omega}.$$

Тогда получим

$$P_{zz} + 2\bar{k}_2P_{yz} + \bar{k}_3P_{yy} = \bar{l}_1(z, y)P_z(z, y) + \bar{l}_2(z, y)P_y(z, y) + \bar{l}_3(z, y)P(z, y) + \bar{l}_4(z, y)\tilde{\omega}_z(z, y) + \bar{l}_5(z, y)\tilde{\omega}(z, y), (z, y) \in S'_\varepsilon, \quad (29)$$

$$P(0, y) = P_z(0, y) = 0, \quad (30)$$

где

$$\theta(z, y) = Q_y / Q, \bar{k}_4(z, y) = \frac{k_4}{k_1}, \bar{k}_5(z, y) = \frac{k_5}{k_1}, \bar{l}_1(z, y) = -2\bar{k}_2y - \bar{k}_4,$$

$$\bar{l}_2(z, y) = -2\bar{k}_3y - \bar{k}_5, \bar{l}_3(x, y) = 2\bar{k}_2\theta_z + 2\bar{k}_3\theta_y - \bar{l}_2\theta - \frac{a_{2y}}{Q},$$

$$\bar{l}_4(x, y) = 2\theta_z - (\bar{l}_1 - 2\bar{k}_2)\theta - \frac{a_{1y}}{Q}, \bar{l}_5(x, y) = \theta_{zz} + 2\bar{k}_2\theta_{zy} + \bar{k}_3\theta - \bar{l}_1\theta_z - \bar{l}_2\theta_y - \frac{a_{3y}}{Q}.$$

Отсюда получаем

$$|P_{zz} + 2\bar{k}_2P_{yz} + \bar{k}_3P_{yy}| \leq M[|P_z| + |P_y| + |P| + |\tilde{\omega}_y| + |\tilde{\omega}|], M > 0, \quad (31)$$

$$P(0, y) = P_z(0, y) = 0. \quad (32)$$

Здесь и всюду через M и C будем обозначать, вообще говоря, различные константы.

Лемма 4. Справедливо следующее интегральное представление

$$\tilde{\omega}(z, y) = \rho_1(z, y) \int_{\beta(z)}^y \rho_2(z, \tau) P(z, \tau) d\tau, \quad \rho_i(z, y) \in C^1(S'_\varepsilon), i = 1, 2, \quad (33)$$

и неравенство

$$|\tilde{\omega}_z(z, y)| \leq M \left[\int_{\beta(z)}^y |P_z| d\tau + \int_{\beta(z)}^y |P_y(z, \tau)| d\tau + \int_{\beta(z)}^y |P| d\tau + |P| \right], M > 0. \quad (34)$$

Доказательство. Рассмотрим следующую задачу

$$\tilde{\omega}_y + \frac{Q_y}{Q} \tilde{\omega} = P(z, y), \quad (35)$$

$$\tilde{\omega}(z, \beta(z)) = 0. \quad (36)$$

Решая задачу (35)–(36), получим (33). Дифференцируя (33) по z и учитывая, что

$$P(z, \beta(z)) = P(z, y) - \int_{\beta(z)}^y \frac{\partial P}{\partial y}(z, \tau) d\tau.$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_z(z, y) = & \rho_{1z}(z, y) \int_{\beta(z)}^y \rho_2(z, \tau) P(z, \tau) d\tau + \rho_1(z, y) \left\{ -[P(z, y) + \int_{\beta(z)}^y P_y(z, \tau) d\tau] \beta'(z) + \right. \\ & \left. + \int_{\beta(z)}^y \rho_{2z}(z, \tau) P(z, \tau) d\tau + \int_{\beta(z)}^y \rho_2(z, \tau) P_z(z, \tau) d\tau \right\}. \end{aligned}$$

Учитывая это, получим (34). Лемма доказана.

Пусть $\lambda, \nu = \text{const} > 0$, $\varepsilon \in (0, \frac{1}{2})$, $\delta \in (0, \varepsilon^2)$. Введем обозначения:

$$\phi(z, y) = z + (y - \beta(z))^2 + \frac{1}{4}, \varphi(z, y) = \exp(2\lambda\phi^{-\nu}),$$

$$H_\delta = \{(z, y) \mid \phi(z, y) < \delta + \frac{1}{4}, z > 0\} \Rightarrow H_\delta \subset S'_\varepsilon, A_\delta = \{(z, y) \in \bar{H}_\delta \mid \phi(z, y) = \delta + \frac{1}{4}\}. \quad (37)$$

Пусть ∂H_δ – граница области H_δ . Очевидно, что

$$\partial H_\delta = A_\delta \cup \{(z, y) \in \bar{H}_\delta : z = 0\}. \quad (38)$$

Лемма 5. Для любой функции $H(z, y) \in C(\bar{H}_\delta)$ справедливо неравенство

$$\int_{H_\delta} \varphi \left[\int_{\beta(z)}^y H(z, \tau) d\tau \right]^2 dz dy \leq \left(\frac{1}{4} + \varepsilon \right)^{\nu+1} (4\lambda\nu)^{-1} \left\{ \int_{H_\delta} H^2 \varphi dz dy + \exp[2\lambda(\frac{1}{4} + \delta)^{-\nu}] \int_{H_\delta} H^2 dz dy \right\}. \quad (39)$$

Доказательство. Введем обозначения:

$$H_{\delta^+} = H_\delta \cap \{y > \beta(z)\}, H_{\delta^-} = H_\delta \cap \{y < \beta(z)\}, d(z) = \beta(z) + (\delta - z)^{1/2}.$$

Применяя неравенство Коши–Буняковского, теорему Фубини и учитывая (38)–(39), получим

$$\int_{H_{\delta^+}} \varphi \left[\int_{\beta(z)}^y H(z, \tau) d\tau \right]^2 dz dy \leq \int_0^\delta dz \int_{\beta(z)}^{d(z)} H^2(z, \tau) d\tau \int_\tau^{d(z)} \varphi [y - \beta(z)] dy \leq \left(\frac{1}{4} + \varepsilon \right)^{\nu+1} (4\lambda\nu)^{-1} \times$$

$$\times \int_0^\delta dz \left[\int_{\beta(z)} H^2(z, \tau) d\tau \int_\tau^{d(z)} \left(-\frac{\partial \phi}{\partial y}\right) dy \right] = \left(\frac{1}{4} + \varepsilon\right)^{\nu+1} (4\lambda\nu)^{-1} \left\{ \int_{H_\delta^+} H^2 \phi dz dy + \exp\left[2\lambda\left(\frac{1}{4} + \delta\right)^{-\nu}\right] \int_{H_\delta^+} H^2 dz dy \right\}.$$

Поступая аналогично в случае H_δ^- , приходим к утверждению леммы.

Лемма 6. Найдутся достаточно большие положительные числа λ, ν , зависящие от коэффициентов \bar{k}_2, \bar{k}_3 , и константа C , такие, что справедлива следующая оценка типа Карлемана [11, с. 93].

$$\lambda\nu\phi|\nabla P|^2 + \lambda^3\nu^4\phi^{-2\nu-2}\phi P^2 \leq C\lambda\nu\phi(P_{zz} + 2\bar{k}_2P_{yz} + \bar{k}_3P_{yy})P + C\phi^{\nu+2}\phi(P_{zz} + 2\bar{k}_2P_{yz} + \bar{k}_3P_{yy})^2 + \operatorname{div} U, \quad (z, y) \in H_\delta, \lambda \geq \lambda_0, \nu \geq \nu_0, \quad (40)$$

где

$$|U| \leq C\nu^3\lambda^3\phi^{-2\nu-2}\phi[P_z^2 + P_y^2 + P^2]. \quad (41)$$

Доказательство теоремы (подробности [11, с. 93–99]). Из неравенства (40), учитывая (33) и (34), получим

$$\begin{aligned} \lambda\nu\phi|\nabla P|^2 + \lambda^3\nu^4\phi^{-2\nu-2}\phi P^2 &\leq MC\lambda(\nu\phi|P||P_z| + \nu\phi|P||P_y| + \nu\phi P^2) + \\ &+ C(M\lambda\nu + M^2\phi^{\nu+2})\phi\left\{\left[\int_{\beta(z)}^y |P_z| d\tau\right]^2 + \left[\int_{\beta(z)}^y |P_y| d\tau\right]^2 + \left[\int_{\beta(z)}^y |P| d\tau\right]^2\right\} + \\ &+ CM^2\phi^{\nu+2}\phi(P^2 + |\nabla P|^2) + \operatorname{div} U. \end{aligned}$$

Отсюда имеем

$$\begin{aligned} \lambda\nu\phi|\nabla P|^2 + \lambda^3\nu^4\phi^{-2\nu-2}\phi P^2 &\leq [(M + M^2)C\lambda\phi](\nu^{1/2}|\nabla P|^2 + \nu^{3/2}P^2) + \\ &+ C(M\lambda\nu + M^2\phi^{\nu+2})\phi\left\{\left[\int_{\beta(z)}^y |P_z| d\tau\right]^2 + \left[\int_{\beta(z)}^y |P_y| d\tau\right]^2 + \left[\int_{\beta(z)}^y |P| d\tau\right]^2\right\} + \operatorname{div} U, \end{aligned}$$

с некоторой новой постоянной C . Из последнего неравенства имеем

$$\begin{aligned} \lambda\nu[1 - (M + M^2)\nu^{-1/2}C]\phi|\nabla P|^2 + \lambda^3\nu^4\phi^{-2\nu-2}[1 - (M + M^2)\nu^{-5/2}C]\phi P^2 &\leq \\ \leq (M + M^2)C\lambda\nu\phi\left\{\left[\int_{\beta(z)}^y |P_z| d\tau\right]^2 + \left[\int_{\beta(z)}^y |P_y| d\tau\right]^2 + \left[\int_{\beta(z)}^y |P| d\tau\right]^2\right\} + \operatorname{div} U, \end{aligned}$$

с некоторой новой постоянной C . Интегрируя получающееся при этом неравенство по области H_δ и учитывая (37)–(39) и (41), имеем

$$\begin{aligned} \lambda\nu[1 - (M + M^2)\nu^{-1/2}C] \int_{H_\delta} \phi|\nabla P|^2 dz dy + \lambda^3\nu^4[1 - (M + M^2)\nu^{-5/2}C] \times \\ \times \int_{H_\delta} \phi^{-2\nu-2}\phi P^2 dz dy \leq (M + M^2)C\left(\frac{1}{4} + \varepsilon\right)^{\nu+1} \left\{ \int_{H_\delta} \left(\phi^{-2\nu-2}P^2 + |\nabla P|^2\right)\phi dz dy + \right. \\ \left. + \exp\left[2\lambda\left(\frac{1}{4} + \delta\right)^{-\nu}\right] \int_{H_\delta} (P^2 + |\nabla P|^2) dz dy \right\} + C \exp\left[2\lambda\left(\frac{1}{4} + \delta\right)^{-\nu}\right] \lambda^3\nu^4\left(\frac{1}{4} + \delta\right)^{-2\nu-2} \int_{A_\delta} (P^2 + |\nabla P|^2) ds. \end{aligned}$$

Отсюда получаем

$$\begin{aligned} \lambda\nu\left[1 - (M + M^2)\nu^{-1/2}C - (M + M^2)\nu^{-1}C\left(\frac{1}{4} + \varepsilon\right)^{\nu+1}\right] \int_{H_\delta} \phi|\nabla P|^2 dz dy + \\ + \lambda^3\nu^4\left[1 - (M + M^2)\nu^{-5/2}C\left(\frac{1}{4} + \varepsilon\right)^{\nu+1} - (M + M^2)C\nu^{-4}\left(\frac{1}{4} + \varepsilon\right)^{\nu+1}\right] \int_{H_\delta} \phi^{-2\nu-2}\phi P^2 dz dy \leq \end{aligned}$$

$$\leq C \exp \left[2\lambda \left(\frac{1}{4} + \delta \right)^{-\nu} \right] \int_{H_\delta} (P^2 + |\nabla P|^2) dz dy + C \exp \left[2\lambda \left(\frac{1}{4} + \delta \right)^{-\nu} \right] \lambda^3 \nu^4 \left(\frac{1}{4} + \delta \right)^{-2\nu-2} \int_{A_\delta} (P^2 + |\nabla P|^2) ds.$$

Если ν достаточно велико, то можно считать

$$(M + M^2) C \nu^{-1/2} + (M + M^2) C \nu^{-1} \left(\frac{1}{4} + \varepsilon \right)^{\nu+1} \leq \frac{1}{2},$$

$$(M + M^2) C \nu^{-5/2} + (M + M^2) C \nu^{-4} \left(\frac{1}{4} + \varepsilon \right)^{\nu+1} \leq \frac{1}{2}.$$

Учитывая, что ν выбрано таким образом, получим

$$\lambda \nu \int_{H_\delta} \phi |\nabla P|^2 dz dy + \lambda^3 \nu^4 \int_{H_\delta} \phi^{-2\nu-2} \phi P^2 dz dy \leq C \exp \left[2\lambda \left(\frac{1}{4} + \delta \right)^{-\nu} \right] \times$$

$$\times \int_{H_\delta} (P^2 + |\nabla P|^2) dz dy + C \exp \left[2\lambda \left(\frac{1}{4} + \delta \right)^{-\nu} \right] \lambda^3 \nu^4 \left(\frac{1}{4} + \delta \right)^{-2\nu-2} \int_{A_\delta} (P^2 + |\nabla P|^2) ds.$$

Отсюда получим, что при достаточно большом λ

$$\lambda^3 \nu^4 \int_{H_\delta} \phi^{-2\nu-2} \phi P^2 dz dy \leq C \lambda^3 \nu^4 \left(\frac{1}{4} + \delta \right)^{-2\nu-2} \exp \left[2\lambda \left(\frac{1}{4} + \delta \right)^{-\nu} \right].$$

Пусть $\delta_1 \in (0, \delta)$ – произвольное число. Из (37) следует, что

$$\phi(z, y) < \frac{1}{4} + \delta_1, (z, y) \in H_{\delta_1}.$$

Тогда получим

$$\lambda^3 \nu^4 \int_{H_{\delta_1}} \phi^{-2\nu-2} \phi P^2 dz dy \leq C \lambda^3 \nu^4 \left(\frac{1}{4} + \delta \right)^{-2\nu-2} \exp \left[2\lambda \left(\frac{1}{4} + \delta \right)^{-\nu} \right].$$

Отсюда имеем

$$\lambda^3 \nu^4 \left(\frac{1}{4} + \delta_1 \right)^{-2\nu-2} \exp \left[2\lambda \left(\frac{1}{4} + \delta_1 \right)^{-\nu} \right] \int_{H_{\delta_1}} P^2 dz dy \leq C \lambda^3 \nu^4 \left(\frac{1}{4} + \delta \right)^{-2\nu-2} \exp \left[2\lambda \left(\frac{1}{4} + \delta \right)^{-\nu} \right].$$

Отсюда разделим обе части неравенства на выражения

$$\lambda^3 \nu^4 \left(\frac{1}{4} + \delta_1 \right)^{-2\nu-2} \exp \left[2\lambda \left(\frac{1}{4} + \delta_1 \right)^{-\nu} \right].$$

Тогда получим

$$\int_{H_{\delta_1}} P^2 dz dy \leq C \exp 2\lambda \left[\left(\frac{1}{4} + \delta \right)^{-\nu} - \left(\frac{1}{4} + \delta_1 \right)^{-\nu} \right].$$

Устремив $\lambda \rightarrow \infty$, получим, что

$$\int_{H_{\delta_1}} P^2 dz dy = 0.$$

Отсюда получаем, что $P(z, y) = 0$ на H_{δ_1} . Следовательно, в силу произвольности $\delta_1 \in (0, \delta)$ получаем $P(z, y) = 0, (z, y) \in H_\delta$. Тогда из (33) получаем $\tilde{\omega}(z, y) \equiv 0, (z, y) \in H_\delta$, а из (27) получим $q(z) \equiv 0, z \in (0, \delta)$. Пусть $\beta = \alpha_1 + \delta$. Согласно лемме 2 функция $u(x, y)$ в области D_β определяется единственным образом. Всю область D_{α_2} можно исчерпать после конечного числа вышеописанных шагов. Таким образом, теорема доказана.

Литература

1. Искендеров, А.Д. Обратная задача об определении коэффициентов квазилинейного эллиптического уравнения / А.Д. Искендеров // Изв. АН Аз.ССР. – 1978. – № 2. – С. 80–85.
2. Клибанов, М.В. Единственность в целом обратных задач для одного класса дифференциальных уравнений / М.В. Клибанов // Дифференциальные уравнения. – 1984. – Т. 20, № 11. – С. 1947–1953.

3. Sylvester, J. A Global uniqueness theorem for an inverse boundary value problem / J. Sylvester, G. Uhlmann // *Annals of Mathematics*. – 1987. – Vol. 125. – P. 153–169.
4. Вабищевич, П.Н. О единственности некоторых обратных задач для эллиптических уравнений / П.Н. Вабищевич // *Дифференциальные уравнения*. – 1988. – Т. 24, № 12. – С. 2125–2129.
5. Соловьев, В.В. Обратные задачи определения источника и коэффициента в эллиптическом уравнении в прямоугольнике / В.В. Соловьев // *Журнал вычислительной математики и математической физики*. – 2007. – Т. 47, № 8. – С. 1365–1377.
6. Yang, R. Inverse coefficient problems for nonlinear elliptic equations / R. Yang, Y. Ou // *ANZIAM*. – 2007. – Vol. 49, no. 2. – P. 271–279.
7. Вахитов, И.С. Обратная задача идентификации старшего коэффициента в уравнении диффузии–реакции / И.С. Вахитов // *Дальневосточный математический журнал*. – 2010. – Т. 10, № 2. – С. 93–105.
8. Денисов, А.М. Введение в теорию обратных задач / А.М. Денисов. – М.: Наука, 1995. – 206 с.
9. Алиев, Р.А. Об одной обратной задаче для квазилинейного уравнения эллиптического типа / Р.А. Алиев // *Известия Саратовского университета. Новая Серия. Серия Математика. Механика. Информатика*. – 2011. – Т. 11. – Вып. 1. – С. 3–9.
10. Клибанов, М.В. Об одном классе обратных задач для нелинейных параболических уравнений / М.В. Клибанов // *Сибирский математический журнал*. – 1986. – Т. 27, № 5. – С. 83–94.
11. Лаврентьев, М.М. Некорректные задачи математической физики и анализа / М.М. Лаврентьев, В.Г. Романов, С.П. Шишатский. – М.: Наука, 1980. – 288 с.
12. Хермандер, Л. Линейные дифференциальные операторы с частными производными / Л. Хермандер. – М.: Мир, 1965. – 379 с.

Поступила в редакцию 19 декабря 2012 г.

**INVERSE PROBLEM OF DETERMINATION OF COEFFICIENT
IN THE ELLIPTIC EQUATION**R.A. Aliyev¹

The inverse problem of determination of coefficient in the elliptic equation in a rectangle is considered. Identification problem of unknown denseness of sources and coefficients lead to similar inverse problems. The theorem of uniqueness of the formulated inverse problem is proved using Karleman's evaluation method. Researches are carried out in a class of continuously differentiable functions derivatives of which satisfy the Holder condition.

Keywords: inverse problem; elliptic equation.

References

1. Iskenderov A.D. *Izvestiya AN Az.SSR*. 1978. no. 2. pp. 80–85. (in Russ.).
2. Klivanov M.V. *Differentsial'nye uravneniya*. 1984. Vol. 20, no. 11. pp. 1947–1953. (in Russ.).
3. Sylvester J., Uhlmann G. A global uniqueness theorem for an inverse boundary value problem // *Annals of Mathematics*. 1987. Vol. 125. pp. 153–169.
4. Vabishchevich P.N. *Differentsial'nye uravneniya*. 1988. Vol. 24, no. 12. pp. 2125–2129. (in Russ.).
5. Solov'ev V.V. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki*. 2007. Vol. 47, no. 8. pp. 1365–1377. (in Russ.).
6. Runsheng Yang and Yunhua Ou Inverse coefficient problems for nonlinear elliptic equations. *ANZIAM*. 2007. Vol. 49, no. 2. pp. 271–279. <http://dx.doi.org/10.1017/S1446181100012839>
7. Vakhitov I.S. *Dal'nevostochnyy matematicheskiy zhurnal*. 2010. Vol. 10, no. 2. pp. 93–105. (in Russ.).
8. Denisov A.M. *Vvedenie v teoriyu obratnykh zadach* (Introduction into inverse problems theory). Moscow, Nauka Publ., 1995. 206 p. (in Russ.).
9. Aliyev R.A. An Inverse Problem for Quasilinear Elliptic Equations. *Izvestiya of Saratov University. New Series. Series: Mathematics. Mechanics. Informatics*. 2011. Vol. 11. Issue 1. pp. 3–9.
10. Klivanov M.V. *Sibirskiy matematicheskiy zhurnal*. 1986. Vol. 27, no. 5. pp. 83–94.
11. Lavrent'ev M.M., Romanov V.G., Shishatskiy S.P. *Nekorrektnye zadachi matematicheskoy fiziki i analiza* (Illposed problems of mathematical physics and analysis). Moscow, Nauka Publ., 1980. 286 c. (in Russ.).
12. Khhermander L. *Lineynye differentsial'nye operatory s chastnymi proizvodnymi* (Linear differential operators with partial derivatives). Moscow, Mir Publ., 1965. 379 p. (in Russ.). [Hörmander L. Linear partial differential operators. Academic Press and Springer-Verlag, New York, 1963.]

Received 19 December 2012

¹ Aliyev Ramiz Atash oqli is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Information and Information System Department, Azerbaijan University of Cooperation, Baku, Azerbaijan.
E-mail: ramizaliyev3@rambler.ru

АНАЛИЗ ДИССИПАЦИИ ЭНЕРГИИ В ПОВЕРХНОСТНОМ СЛОЕ ДЛЯ КОНТАКТНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО СОПРОТИВЛЕНИЯ¹

А.В. Дмитриев², А.А. Ершов³

Рассмотрена двумерная задача протекания электрического тока через прямоугольную пластину с контактами малой площади, пропорциональной малому параметру. Найден главный член асимптотики x_p – толщины слоя, в котором выделяется часть p от энергии, связанной с контактным сопротивлением при площади контактов, стремящейся к нулю.

Ключевые слова: краевая задача; пластинчатый кристалл графита; асимптотическое разложение; малый параметр; толщина дефектного слоя; композиционный материал; сеть сопротивлений; цепочечная модель; преобладание контактного электрического сопротивления.

Введение

В работе [1] приведен анализ влияния поверхностного слоя на диссипацию энергии в области контактов проводников применительно к композиции на основе природного чешуйчатого графита. Полагается, что на поверхности пластинчатых зерен наполнителя имеется тонкий дефектный слой. В качестве критерия использовали $x_{0,5}$ как толщину слоя, в котором выделяется 50 % энергии, связанной с контактным сопротивлением. Считали, что толщина слоя характеризуется $x_{0,5}$, что влияет на магнетосопротивление материала через магнетосопротивление микроконтактов. Оно изменилось при переходе от прижимных контактов к спеченным при помощи закоксованных мостиков пека связующего. Если поверхностный дефектный слой совпадает с $x_{0,5}$, то в удельное электрическое сопротивление композиции с непроводящей матрицей входит соответствующая доля сопротивления. Интерес представляет определение зависимости между долей вклада в удельное электрическое сопротивление чешуек и толщиной слоев графита, в которой эта доля энергии выделяется. Для простоты рассматриваем двумерный случай, параметрами являются размеры пластинчатых проводников и сечения электрических пятен контактов между ними. Ранее в работе [1] это было вычислено для $x_{0,5}$ с помощью метода сеток [2, гл. 3, п. 45], результаты линейно интерполированы на область при малых значениях сечения контактов, где метод сеток неприменим. Однако интерес представляет получение аналитической зависимости величины толщины слоя x_p для p -ой доли диссипации энергии от сечения контактов 2ε , стремящегося к нулю. Эта зависимость, как выяснилось при аккуратном асимптотическом исследовании, отличается от линейной.

1. Первый случай (контакты на разных сторонах)

Рассмотрим прохождение электрического тока через пластину единичной толщины по следующей схеме (рис. 1).

Если контакты параллельны кристаллографическим плоскостям, то с точностью до линейных замен образец можно считать анизотропным. Для простоты будем считать, что проводимость данного образца равна единице ($\sigma_x = \sigma_y = 1$). Как показано в работе [3], хорошим математическим приближением потенциала электрического поля этого образца при малых контактах может быть решение следующей краевой задачи:

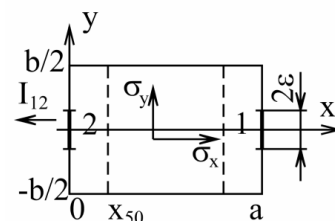


Рис. 1

¹ Работа проводилась при финансовой поддержке РФФИ № 12-01-00259-а, ФЦП № 02.740.11.0612, госбюджет № 1.731.2011 и «Фонда поддержки молодых ученых «Конкурс Мебиуса».

² Дмитриев Антон Владимирович – кандидат технических наук, преподаватель, кафедра химии твердого тела и нанопроцессов, Челябинский государственный университет.

E-mail: admittiev@csu.ru

³ Ершов Александр Анатольевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра вычислительной математики, Челябинский государственный университет.

E-mail: ale10919@yandex.ru

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta u = 0 \quad \text{в} \quad D = \{0 < x < a, -b/2 < y < b/2\}, \\ \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{y=-b/2, b/2} = 0, \\ \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0, a} = 0, \quad \text{при} \quad y \in (-b/2, -\varepsilon) \cup (\varepsilon, b/2), \\ \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0, a} = \frac{1}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 - y^2}}, \quad \text{при} \quad y \in (-\varepsilon, \varepsilon). \end{array} \right.$$

Полную выделяемую энергию можно вычислить по формуле $W = \int_0^a \int_{-b/2}^{b/2} \nabla^2 u(x, y) dy dx$. В ней

можно выделить часть, связанную с контактным сопротивлением, возникающим из-за того, что контакты занимают не всю сторону образца, т.е.

$$W_{\text{конт.}} = W - I^2 R_{\text{ом.}} = W - 1 \cdot \frac{a}{b},$$

где $I = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{\partial u}{\partial x}(0, y) dy = 1$ – сила тока, протекающего через образец, $R_{\text{ом.}} = \frac{a}{b}$ – омическое сопротивление.

Контактное электрическое сопротивление является переходным электрическим сопротивлением между проводниками. При расчете омического сопротивления сечение пятен контактов выбирается так, чтобы в проводнике плотность электрического тока и напряженность электрического поля были однородными во всем объеме. При уменьшении сечения пятен контактов образуется контактное электрическое сопротивление за счет стягивания линий тока к пятнам контактов, вычисляемое как добавка к омическому электрическому сопротивлению проводника [4]. Если области стягивания линий тока к пятнам контактов перекрываются, то омическое сопротивление, связанное с прямолинейным протеканием электрического тока в объеме проводника, отсутствует. Следует отметить, что электрическое сопротивление из-за стягивания линий тока к пятнам контактов значительно превышает омическое для того же электрического тока через проводник при его однородном протекании. Для чешуек графита это связано со значительной анизотропией проводимости вдоль и поперек слоев, так что при подключении по варианту с расположением контактов по одну сторону оснований наибольшая плотность тока приходится на слои, прилегающие к пятнам контактов. В отдаленных слоях плотность электрического тока оказывается пренебрежимо малой. Судя по снижению магнетосопротивления на порядок, при переходе к прижимным контактам именно они и определяют диссипацию электрической энергии. В этом случае омическим сопротивлением можно пренебречь. Учет омического сопротивления при случае спеченных контактов требует учета подключения чешуек вдоль и поперек слоев. Как показано в [1, 5], электрофизические свойства характеризуются контактным электрическим сопротивлением, и омическая составляющая невелика по сравнению с контактной. Подробно образование контактного электрического сопротивления и его свойства применительно к пластинчатым кристаллам графита исследованы методом электрогидродинамического моделирования на пластинках отожженного пирографита (см. [5]). При решении соответствующих граничных условий задач в настоящей работе омическое сопротивление, свойственное прямолинейному протеканию электрического тока, вычисляется отдельно и вычитается из общего электрического сопротивления, определяемого вычислением, так что в результате определяется только электрическое контактное сопротивление, связанное с искривлением линий тока при его стягивании к пятнам контактов.

Введём обозначения:

$$W_p = \int_0^{x_p} \int_{-b/2}^{b/2} \nabla^2 u dy dx - \text{энергия, выделяемая в слое толщины } x_p,$$

$W_{p, \text{конт.}} = W_p - \frac{x_p}{b}$ – контактная энергия, выделяемая в том же слое.

Величину x_p определим так, чтобы в ней выделялась p -ая часть контактной энергии, связанной с одним контактом, т.е. x_p определяется из следующего уравнения

$$W_{p, \text{конт.}} = p \cdot \frac{W_{\text{конт.}}}{2}. \quad (1)$$

Итак, наша задача состоит в том, чтобы найти асимптотику $x_p(\varepsilon)$ при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Стандартным методом Фурье несложно найти

$$u(x, y) = \frac{x}{b} + \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0\left(\frac{2\pi n}{b} \varepsilon\right)}{n \cdot \text{sh}\left(\frac{2\pi n}{b} a\right)} \left(\text{ch}\left(\frac{2\pi n}{b} x\right) - \text{ch}\left(\frac{2\pi n}{b} (a-x)\right) \right) \cos\left(\frac{2\pi n}{b} y\right),$$

где $J_0(x) = \frac{2}{\pi} \int_0^1 \frac{\cos(xy)}{\sqrt{1-y^2}} dy$ – функция Бесселя.

Пользуясь этим решением, вычислим в виде рядов

$$W = \int_0^a \int_{-b/2}^{b/2} \nabla^2 u(x, y) dy dx = \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0\left(\frac{2\pi n}{b} \varepsilon\right)}{n \cdot \text{sh}^2\left(\frac{2\pi n}{b} a\right)} \left(\text{sh}\left(\frac{4\pi n}{b} a\right) - 2 \text{sh}\left(\frac{2\pi n}{b} a\right) \right) + \frac{a}{b},$$

$$W_p = \int_0^{x_p} \int_{-b/2}^{b/2} \nabla^2 u(x, y) dy dx = \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0^2\left(\frac{2\pi n}{b} \varepsilon\right)}{n \cdot \text{sh}^2\left(\frac{2\pi n}{b} a\right)} \times$$

$$\times \left(\frac{\text{sh}\left(\frac{4\pi n}{b} x_p\right)}{2} + \text{sh}\left(\frac{2\pi n}{b} (a-2x_p)\right) - \text{sh}\left(\frac{2\pi n}{b} a\right) + \frac{\text{sh}\left(\frac{4\pi n}{b} (a-x_p)\right)}{2} + \frac{\text{sh}\left(\frac{4\pi n}{b} a\right)}{2} \right) + \frac{x_p}{b}.$$

Асимптотика W была уже ранее найдена в работе [3], для этого она была выражена с помощью альтернативной формулы

$$W = I \cdot \Delta U = 1 \cdot \left(\frac{a}{b} + \frac{2}{\pi} \ln\left(\frac{b}{\pi \varepsilon}\right) - \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\pi a}{b} n}}{n \cdot \text{ch}\left(\frac{\pi a}{b} n\right)} + O(\varepsilon) \right),$$

где разность потенциалов

$$\Delta U = u(a, 0) - u(0, 0) + O(\varepsilon) = \frac{a}{b} + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0\left(\frac{2\pi n}{b} \varepsilon\right)}{n} \text{th}\left(\frac{\pi n a}{b}\right) + O(\varepsilon) =$$

$$= \frac{a}{b} + \frac{2}{\pi} \ln\left(\frac{b}{\pi \varepsilon}\right) - \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\pi a}{b} n}}{n \cdot \text{ch}\left(\frac{\pi a}{b} n\right)} + O(\varepsilon).$$

Заметим, что

$$\int_0^a \int_{-b/2}^{b/2} \nabla^2 u(x, y) dy dx - I \cdot \Delta U = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0^2\left(\frac{2\pi n}{b} \varepsilon\right)}{n} \text{th}\left(\frac{\pi n}{b} a\right) - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0\left(\frac{2\pi n}{b} \varepsilon\right)}{n} \text{th}\left(\frac{\pi n}{b} a\right) = O(\varepsilon),$$

небольшое различие объясняется тем, что данное решение $u(x, y)$ является постоянным на отрезках подключения только с точностью $O(\varepsilon)$. Однако вычисление асимптотики по альтернативной формуле проще.

Соответственно,

$$W_{\text{конт.}} = \frac{2}{\pi} \left(\ln \left(\frac{b}{\pi \varepsilon} \right) - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\pi a}{b} n}}{n \cdot \text{ch} \left(\frac{\pi a}{b} n \right)} + O(\varepsilon) \right),$$

$$W_{p, \text{конт.}} = \frac{W_{\text{конт.}}}{2} + \frac{1}{\pi} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{J_0^2 \left(\frac{2\pi n}{b} \varepsilon \right)}{n \cdot \text{sh}^2 \left(\frac{2\pi n}{b} a \right)} \left(\frac{\text{sh} \left(\frac{4\pi n}{b} x_p \right)}{2} + \text{sh} \left(\frac{2\pi n}{b} (a - 2x_p) \right) + \frac{\text{sh} \left(\frac{4\pi n}{b} (a - x_p) \right)}{2} \right)$$

$$= \frac{W_{\text{конт.}}}{2} + \frac{1}{\pi} (S_1 + S_2 + S_3).$$

Рассмотрим отдельно асимптотику каждой из трёх сумм S_1 , S_2 и S_3 . Полную равномерную асимптотику этих рядов найти довольно сложно, поэтому будем искать ответ в предположении, что $x_p \sim \varepsilon^\gamma$, $0 < \gamma < 1$.

$$S_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0^2 \left(\frac{2\pi n}{b} \varepsilon \right)}{n \cdot \text{sh}^2 \left(\frac{2\pi n}{b} a \right)} \frac{\text{sh} \left(\frac{4\pi n}{b} x_p \right)}{2} = O(x_p),$$

$$S_2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0^2 \left(\frac{2\pi n}{b} \varepsilon \right)}{n \cdot \text{sh}^2 \left(\frac{2\pi n}{b} a \right)} \text{sh} \left(\frac{2\pi n}{b} (a - 2x_p) \right) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n \cdot \text{sh} \left(\frac{2\pi n}{b} a \right)} + O(x_p),$$

$$S_3 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0^2 \left(\frac{2\pi n}{b} \varepsilon \right)}{n \cdot \text{sh}^2 \left(\frac{2\pi n}{b} a \right)} \frac{\text{sh} \left(\frac{4\pi n}{b} (x_p - a) \right)}{2} = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0^2 \left(\frac{2\pi n}{b} \varepsilon \right)}{n \cdot \text{sh}^2 \left(\frac{2\pi n}{b} a \right)} \frac{e^{-\frac{4\pi n}{b} a} \cdot e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p}}{4} +$$

$$+ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0^2 \left(\frac{2\pi n}{b} \varepsilon \right)}{n \cdot \text{sh}^2 \left(\frac{2\pi n}{b} a \right)} \frac{e^{-\frac{4\pi n}{b} a}}{4} + O(x_p) = - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0^2 \left(\frac{2\pi n}{b} \varepsilon \right)}{n} \frac{e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p}}{4} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{2\pi n}{b} a}}{n \cdot \text{sh} \left(\frac{2\pi n}{b} a \right)} + O(x_p).$$

Рассмотрим отдельно асимптотику суммы $S = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{J_0^2 \left(\frac{2\pi n}{b} \varepsilon \right)}{n} e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p}$. Воспользуемся оценками $J_0(x) = 1 + O(x)$ и $J_0^2(x) = 1 + O(x)$. Заметим, что они выполняются для любого $x > 0$, т.е. существует постоянная $M > 0$ такая, что $|J_0^2(x)| \leq 1 + Mx$ при $x > 0$. С учетом этой оценки

$$S = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{(1 + O(n\varepsilon))}{n} e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p}}{n} + O \left(\varepsilon \sum_{m=1}^{\infty} e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p} \right) =$$

$$= \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p}}{n} + O \left(\varepsilon \frac{e^{-\frac{4\pi}{b} x_p}}{1 - e^{-\frac{4\pi}{b} x_p}} \right) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p}}{n} + O \left(\frac{\varepsilon}{x_p} \right).$$

Для вычисления $\sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p}}{n}$ воспользуемся заменой суммы на интеграл [6, гл. 2]:

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p}}{n} &= \int_1^{\infty} \frac{e^{-\frac{4\pi y}{b} x_p}}{y} dy + \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p} - 1}{n} - \int_n^{n+1} \frac{e^{-\frac{4\pi y}{b} x_p} - 1}{y} dy \right) + \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n} - \int_n^{n+1} \frac{dy}{y} \right) = \\ &= \int_1^{\infty} \frac{e^{-\frac{4\pi y}{b} x_p}}{y} dy + C + R, \end{aligned}$$

где $C = \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{1}{n} - \int_n^{n+1} \frac{dy}{y} \right)$ – постоянная Эйлера, $R = \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p} - 1}{n} - \int_n^{n+1} \frac{e^{-\frac{4\pi y}{b} x_p} - 1}{y} dy \right)$.

Заметим, что $\int_1^{\infty} \frac{e^{-\frac{4\pi y}{b} x_p}}{y} dy = E_1\left(\frac{4\pi y}{b} x_p\right) = -C - \ln\left(\frac{4\pi}{b} x_p\right) + O(x_p)$ при $x_p \rightarrow 0$, где

$$E_1(x) = \int_1^{\infty} \frac{e^{-xy}}{y} dy = [xy = z] = \int_x^{\infty} \frac{e^{-z}}{z} dz = -C - \ln x - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-x)^n}{n!n} - \text{интегральная показательная функция [7].}$$

Чтобы оценить остаток R , введём вспомогательную функцию $F(y) = \frac{e^{-\frac{4\pi y}{b} x_p} - 1}{y}$. Легко вычислить ее вторую производную $F''(y) = \frac{16\pi^2 x_p^2}{b^2} \frac{e^{-\frac{4\pi y}{b} x_p}}{y} + \frac{4\pi x_p}{b} \frac{e^{-\frac{4\pi y}{b} x_p}}{y^2} + \frac{e^{-\frac{4\pi y}{b} x_p} - 1}{y^3}$. Также воспользуемся разложением этой функции в ряд Тейлора с остаточным членом в дифференциальной форме. Тогда

$$\begin{aligned} |R| &= \left| \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p} - 1}{n} - \int_n^{n+1} \frac{e^{-\frac{4\pi y}{b} x_p} - 1}{y} dy \right) \right| = \left| \sum_{m=1}^{\infty} \left(\frac{e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p} - 1}{n} - \int_{n-1/2}^{n+1/2} \frac{e^{-\frac{4\pi y}{b} x_p} - 1}{y} dy \right) \right| + O(x_p) \leq \\ &\leq \left| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2} F''(n + \theta_n) \int_{n-1/2}^{n+1/2} (y-n)^2 dy \right| + O(x_p) \leq M_1 x_p^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p}}{n} + M_2 x_p^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p}}{n^2} + M_3 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1 - e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p}}{n^3} + \\ &+ O(x_p) \leq M_1 x_p^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{4\pi n}{b} x_p}}{n} + M_2 x_p^2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} + M_3 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{4\pi n x_p}{bn^3} + O(x_p) = O(x_p). \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} W_{p, \text{конт.}} &= \frac{W_{\text{конт.}}}{2} - \frac{1}{\pi} \ln \frac{b}{4\pi x_p} + \frac{1}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\pi n}{b} a}}{n \cdot \text{ch}\left(\frac{\pi n}{b} a\right)} + O(x_p) + O\left(\frac{\varepsilon}{x_p}\right) = \\ &= \frac{1}{\pi} \ln \frac{b}{\pi \varepsilon} - \frac{1}{\pi} \ln \frac{b}{4\pi x_p} + O(x_p) + O\left(\frac{\varepsilon}{x_p}\right) = \frac{1}{\pi} \ln \frac{4\pi x_p}{\varepsilon} + O(x_p) + O\left(\frac{\varepsilon}{x_p}\right). \end{aligned}$$

Подставив эту асимптотику для $W_{p, \text{конт.}}$ в (1), получим следующее уравнение для x_p :

$$\frac{1}{\pi} \ln \frac{b}{\pi \varepsilon} - \frac{1}{\pi} \ln \frac{b}{4\pi x_p} + O(x_p) + O\left(\frac{\varepsilon}{x_p}\right) = p \cdot \frac{W_{\text{конт.}}}{2} + O(x_p) + O\left(\frac{\varepsilon}{x_p}\right).$$

Отсюда, пользуясь асимптотическим разложением для $W_{\text{конт.}}$ при $\varepsilon \rightarrow 0$, можно получить, что

$$\ln \frac{b}{4\pi x_p} = (1-p) \ln \frac{b}{\pi \varepsilon} + p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\pi n}{b} a}}{n \cdot \text{ch}\left(\frac{\pi n}{b} a\right)} + O(x_p) + O\left(\frac{\varepsilon}{x_p}\right).$$

Из последнего равенства выразим x_p , получив окончательный ответ:

$$x_p = \frac{b}{4\pi} \left(\frac{\pi \varepsilon}{b}\right)^{1-p} e^{-p Q_1} (1 + O(\varepsilon^{1-p}) + O(\varepsilon^p)) \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0, \text{ где } Q_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\pi n}{b} a}}{n \cdot \text{ch}\left(\frac{\pi n}{b} a\right)}.$$

Заметим, что при достаточно больших соотношениях $\frac{a}{b}$ постоянная $e^{-p Q_1}$ достаточно близка к единице. В реальном случае, когда проводимость не равна единице, вместо уравнения Лапласа имеет место уравнение $\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\sigma_y}{\sigma_x} \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = 0$, но после соответствующих линейных замен можно получить формулу:

$$x_p = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\sigma_x}{\sigma_y}} \frac{b}{\pi} \left(\frac{\pi \varepsilon}{b}\right)^{1-p} \exp \left(-p \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\pi n}{b} a \sqrt{\frac{\sigma_y}{\sigma_x}}}}{n \cdot \text{ch}\left(\frac{\pi n}{b} a \sqrt{\frac{\sigma_y}{\sigma_x}}\right)} \right) (1 + O(\varepsilon^{1-p}) + O(\varepsilon^p)) \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0.$$

2. Второй случай (контакты на одной стороне)

Рассмотрим прохождение электрического тока через пластину единичной толщины в случае, когда контакты расположены на одной стороне, как показано на рис. 2.

В этом случае для потенциала электрического поля этого образца при малых контактах можно поставить следующую задачу.

$$\left\{ \begin{array}{l} \Delta u = 0 \text{ в } D = \{0 < x < a, 0 < y < b\}, \\ \frac{\partial u}{\partial y} \Big|_{y=0, b} = 0, \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=a} = 0, \\ \frac{\partial u}{\partial x} \Big|_{x=0} = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 - y^2}}, & \text{при } y \in (0, \varepsilon), \\ 0 & \text{при } y \in (\varepsilon, b - \varepsilon), \\ -\frac{2}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 - y^2}}, & \text{при } y \in (b - \varepsilon, b). \end{cases} \end{array} \right.$$

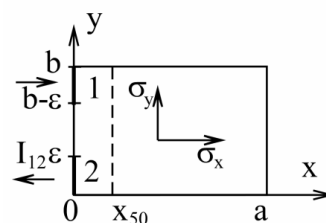


Рис. 2

$$\text{Полная выделяемая энергия равна } W = \int_0^a \int_0^b \nabla^2 u(x, y) dy dx.$$

В этом случае не будем выделять из нее какие-либо части, сопротивление можно считать полностью контактным, т.е. будем считать, что $W_{\text{конт.}} = W$.

Также обозначим за $W_{p, \text{конт.}} = \int_0^{x_p} \int_0^b \nabla^2 u(x, y) dy dx$ энергию, выделяемую в слое толщины x_p .

Величину x_p определим так, чтобы в ней выделялась p -ая часть всей энергии, т.е. x_p определяется из следующего уравнения

$$W_{p, \text{конт.}} = p \cdot \frac{W_{\text{конт.}}}{2}.$$

В этом случае тоже будем искать асимптотику $x_p(\varepsilon)$ при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Стандартным методом Фурье несложно найти

$$u(x, y) = -\frac{4}{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{J_0\left(\frac{\pi(2m+1)}{b}\varepsilon\right)}{(2m+1) \operatorname{sh}\left(\frac{\pi(2m+1)}{b}a\right)} \operatorname{ch}\left(\frac{\pi(2m+1)}{b}(a-x)\right) \cos\left(\frac{\pi(2m+1)}{b}y\right).$$

Пользуясь этим решением, вычислим в виде ряда

$$W = \int_0^a \int_0^b \nabla^2 u(x, y) dy dx = \frac{8}{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{J_0^2\left(\frac{\pi(2m+1)}{b}\varepsilon\right)}{(2m+1)} \operatorname{cth}\left(\frac{\pi(2m+1)}{b}a\right) = \frac{4}{\pi} \left(\ln\left(\frac{2b}{\pi\varepsilon}\right) + Q_2 \right) + O(\varepsilon),$$

где $Q_2 = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2 \exp\left(-\frac{\pi(2m+1)}{b}a\right)}{(2m+1) \cdot \operatorname{sh}\left(\frac{\pi(2m+1)}{b}a\right)}$.

Заметим, что если $b \gg a$, то мощность, связанная с омическим сопротивлением, начинает играть существенную роль. Это проявляется в том, что формулу мощности можно также записать следующим образом:

$$W = \frac{4}{\pi} \ln \frac{4b}{\pi\varepsilon} + \frac{b}{a} + O\left(\frac{a}{b}\right) + O(\varepsilon).$$

Применяя метод замены ряда на интеграл, как в предыдущем случае, можно получить следующую асимптотику:

$$\begin{aligned} W_{p, \text{конт.}} &= \int_0^{x_p} \int_0^b \nabla^2 u(x, y) dy dx = W - \frac{4}{\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{J_0^2\left(\frac{\pi(2m+1)}{b}\varepsilon\right)}{(2m+1) \operatorname{sh}^2\left(\frac{\pi(2m+1)}{b}a\right)} \operatorname{sh}\left(\frac{2\pi(2m+1)}{b}(a-x_p)\right) = \\ &= W - \frac{4}{\pi} \left(\ln \frac{b}{\pi x_p} + Q_2 \right) + O(x_p) + O\left(\frac{\varepsilon}{x_p}\right) = \frac{4}{\pi} \ln \frac{4b}{\pi\varepsilon} - \frac{4}{\pi} \ln \frac{b}{\pi x_p} + O(x_p) + O\left(\frac{\varepsilon}{x_p}\right). \end{aligned}$$

Таким образом,

$$W_{p, \text{конт.}} = \frac{4}{\pi} \ln \frac{4b}{\pi\varepsilon} - \frac{4}{\pi} \ln \frac{b}{\pi x_p} + O(x_p) + O\left(\frac{\varepsilon}{x_p}\right) = p \cdot W.$$

Подставив в это равенство асимптотику полной выделяемой энергии, получим уравнение

$$\ln \frac{b}{\pi x_p} = (1-p) \ln \frac{4b}{\pi\varepsilon} - p Q_2 + O(x_p) + O\left(\frac{\varepsilon}{x_p}\right),$$

из которого можно выразить толщину слоя, в котором выделяется p -ая часть энергии

$$x_p = \frac{1}{4} \frac{4b}{\pi} \left(\frac{\pi\varepsilon}{4b}\right)^{1-p} e^{p Q_2} (1 + O(\varepsilon^p) + O(\varepsilon^{1-p})), \text{ где } Q_2 = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2 \exp\left(-\frac{\pi(2m+1)}{b}a\right)}{(2m+1) \operatorname{sh}\left(\frac{\pi(2m+1)}{b}a\right)}.$$

3. Третий случай (контакты наноскоков)

В этом случае (рис. 3) для потенциала электрического поля этого образца при малых контактах можно поставить следующую задачу.

$$\begin{cases} \Delta u = 0 & \text{в } \{0 < x < a, 0 < y < b\}, \\ \left. \frac{\partial u}{\partial y} \right|_{y=0,b} = 0, \\ \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=0} = \begin{cases} \frac{2}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 - y^2}}, & y \in (0, \varepsilon), \\ 0, & y \in (\varepsilon, b), \end{cases} \\ \left. \frac{\partial u}{\partial x} \right|_{x=a} = \begin{cases} 0, & y \in (0, b - \varepsilon), \\ \frac{2}{\pi} \frac{1}{\sqrt{\varepsilon^2 - y^2}}, & y \in (b - \varepsilon, b). \end{cases} \end{cases}$$

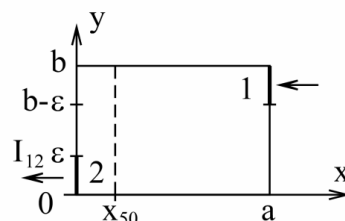


Рис. 3

Методом Фурье можно получить следующее решение этой задачи в рядах

$$u(x, y) = A_0 + \frac{x}{b} + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0\left(\frac{\pi n}{b} \varepsilon\right)}{n \cdot \operatorname{sh}\left(\frac{\pi n}{b} a\right)} \left((-1)^n \operatorname{ch}\left(\frac{\pi n}{b} x\right) - \operatorname{ch}\left(\frac{\pi n}{b} (a - x)\right) \right) \cos\left(\frac{\pi n}{b} y\right).$$

Используя это решение, можно вычислить силу тока $I = 1$, напряжение

$$\begin{aligned} U \approx u(a, b) - u(0, 0) &= \frac{a}{b} + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0\left(\frac{\pi n}{b} \varepsilon\right)}{n \cdot \operatorname{sh}\left(\frac{\pi n}{b} a\right)} \left((-1)^n \operatorname{ch}\left(\frac{\pi n}{b} a\right) - 1 \right) \cos(\pi n) - \\ &- \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0\left(\frac{\pi n}{b} \varepsilon\right)}{n \cdot \operatorname{sh}\left(\frac{\pi n}{b} a\right)} \left((-1)^n - \operatorname{ch}\left(\frac{\pi n}{b} a\right) \right) = \frac{a}{b} + \frac{4}{\pi} \ln \frac{2b}{\pi \varepsilon} + \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\pi n}{b} a} - (-1)^n}{n \cdot \operatorname{sh}\left(\frac{\pi n}{b} a\right)} + O(\varepsilon) \end{aligned}$$

и выделяемую мощность

$$W = \int_0^a \int_0^b \nabla^2 u(x, y) dx dy = \frac{a}{b} + \frac{4}{\pi} \ln \frac{2b}{\pi \varepsilon} + \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\pi n}{b} a} - (-1)^n}{n \cdot \operatorname{sh}\left(\frac{\pi n}{b} a\right)} + O(\varepsilon).$$

Эту мощность можно также разделить на омическую $W_{\text{ом.}} = \frac{a}{b}$ и контактную

$$W_{\text{конт.}} = \frac{4}{\pi} \ln \frac{2b}{\pi \varepsilon} + \frac{4}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\pi n}{b} a} - (-1)^n}{n \cdot \operatorname{sh}\left(\frac{\pi n}{b} a\right)} + O(\varepsilon).$$

Аналогично предыдущим случаям можно найти энергию, выделяемую в слое толщины x_p :

$$\begin{aligned} W_p &= \int_0^{x_p} \int_0^b \nabla^2 u(x, y) dx dy = \frac{x_p}{b} + \frac{2}{\pi} \ln \frac{2b}{\pi \varepsilon} + \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp\left(-\frac{\pi n}{b} a\right)}{n \cdot \operatorname{sh}\left(\frac{\pi n}{b} a\right)} - \frac{2}{\pi} \ln \frac{b}{2\pi x_p} - \\ &- \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp\left(-\frac{\pi n}{b} a\right)}{n \cdot \operatorname{sh}\left(\frac{\pi n}{b} a\right)} + O\left(\frac{\varepsilon}{x_p}\right) + O(x_p) = \frac{x_p}{b} + \frac{2}{\pi} \ln \frac{2b}{\pi \varepsilon} - \frac{2}{\pi} \ln \frac{b}{2\pi x_p} + O\left(\frac{\varepsilon}{x_p}\right) + O(x_p). \end{aligned}$$

Соответственно,

$$W_{p, \text{конт.}} = \frac{2}{\pi} \ln \frac{2b}{\pi \varepsilon} - \frac{2}{\pi} \ln \frac{b}{2\pi x_p} + O\left(\frac{\varepsilon}{x_p}\right) + O(x_p).$$

Поскольку x_p – это толщина слоя, в котором выделяется p -ая часть контактной энергии, связанной с одним контактом, то x_p можно найти из следующего уравнения

$$W_{p, \text{конт.}} = \frac{W_{\text{конт.}}}{2} \cdot p.$$

Отсюда можно найти, что

$$x_p = \frac{1}{4} \frac{2b}{\pi} \left(\frac{\pi \varepsilon}{2b}\right)^{1-p} e^{-pQ_3} \left(1 + O(\varepsilon^p) + O(\varepsilon^{1-p})\right), \text{ где } Q_3 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-\frac{\pi n}{b}a} - (-1)^n}{n \cdot \text{sh}\left(\frac{\pi n}{b}a\right)}.$$

Заключение

Во всех случаях толщина слоя, в котором выделяется p -ая часть энергии, при ширине контакта, равном ε , примерно равна

$$x_p = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\sigma_x}{\sigma_y}} \frac{2b}{\pi} \left(\frac{\pi \varepsilon}{2b}\right)^{1-p} \text{ при } \varepsilon \rightarrow 0. \quad (2)$$

Толщина слоя с заданной диссипацией электрической энергии является характеристикой прижимного контакта. Если поверхностный слой имеет повышенное электрическое сопротивление, то это определяет сопротивление контакта, если в этом слое происходит преимущественно диссипация электрической энергии. Для анализа толщины слоя используют диссипацию в нем 50, 90 и 95 % от всей диссипируемой в данном контакте электрической энергии. Используя формулу, для двумерного случая можно определить как сами величины $x_{0,5}$, $x_{0,9}$ и $x_{0,95}$ по известным значениям сечения пятна контактов, так и соотношения между ними. Ранее для определения величин пятен контактов использовали расчеты для модельного композиционного материала «чешуйчатый графит – пек» связующего. В этом материале после формования заготовок проводимость осуществляется по прижимным контактам. В результате обжига пек связующего коксует и дополнительно к прижимным контактам между чешуйками графита образуются спеченные хорошо проводящие мостики из кокса связующего. Сопротивление этих мостиков меньше, чем сопротивление чешуек графита поперек слоев, и падение напряжения происходит в основном в объеме чешуек. При переходе от прижимных контактов к спеченным удельное электрическое сопротивление материала снижается. Численные значения снижения удельного электрического сопротивления композиционного материала использовали в [1] для оценки толщины слоя с диссипацией энергии в 50, 90 и 95 % с использованием расчета данной доли диссипации энергии численным методом, которая составляла 0,04 мкм, 0,2 мкм и 0,26 мкм соответственно. Для определения сечения пятна контакта в [1] использовали трехмерный случай расчета. Для трехмерного случая электрическое сопротивление контакта обратно пропорционально его радиусу. При экспериментально определенной величине снижения удельного электрического сопротивления модельной композиции в 56 раз, соответственно, увеличивается сечение пятна контакта. При размере чешуек графита в 0,1 мм и расположении на плоской поверхности двух пятен контакта наибольший диаметр пятна контакта составляет 0,05 мм. При обжиге переход от прижимных контактов к спеченным приводит к снижению удельного электрического сопротивления модельной композиции в 56 раз [1]. Соответственно, при таком снижении удельного электрического сопротивления композиции усредненный радиус пятна прижимного контакта оказывается не более 0,001 мм, или 1 мкм. Использование выполненных в настоящей работе расчетов позволяет уточнить оценки толщины поверхностного слоя.

Приблизительно эффективное сечение прижимных контактов определили равным 1 мкм, для удобства вычислений приняли, что растекание тока двумерно, а ширина полоски прижимного контакта равна 1 мкм при размере пластинки 100×100 мкм². Эта величина является усредненной для контактов в композиции на основе чешуйчатого природного графита. Также приняли, что в

формуле (3) σ_x – это проводимость вдоль оси x поперек слоев графита, а σ_y – вдоль слоев. Согласно формуле (2), величина $x_{0,5}$ составляет 1,995 мкм в изотропном случае и 0,02 мкм с учетом анизотропии. Ранее графически определенная в [1] величина $x_{0,5}$ составила 0,04 мкм, что в два раза больше. При $x_{0,5} = 0,02$ мкм и межплоскостном расстоянии 0,335 нм это составит примерно 62 слоя графита.

При вычислении толщины дефектного слоя в [1] использовали снижение удельного электрического сопротивления и магнетосопротивления при переходе от спеченных электрических контактов к прижимным. Для преобладания вклада в общее сопротивление и магнетосопротивление от дефектного слоя его толщина должна обеспечивать диссипацию 90–

95 %. При тех же условиях $\frac{x_{0,9}}{x_{0,5}} \approx \left(\frac{\pi\varepsilon}{2b}\right)^{-0,4} = 5,365$, $\frac{x_{0,95}}{x_{0,5}} \approx \left(\frac{\pi\varepsilon}{2b}\right)^{-0,45} = 6,61$. Соответственно

величины $x_{0,9}$ и $x_{0,95}$ составят 0,107 мкм и 0,132 мкм. При межплоскостном расстоянии 0,335 нм вычисленная толщина составляет 320–400 слоев графита. Расчеты выполнены без учета снижения проводимости дефектами структуры. Так как дефекты структуры увеличивают удельное электрическое сопротивление слоев графита, то можно полагать, что эти оценки характеризуют верхнюю границу толщины дефектного слоя. Поверхностный дефектный слой в [1] введен для объяснения изменения электрофизических свойств композиции «природный графит – связующее» в результате закоксования связующего после обжига. Прижимные микроконтакты между чешуйками природного явнокристаллического графита в модельной композиции образованы сжатием со смещением при изготовлении образцов методом продавливания массы через формирующий калибр. Трение сжатых чешуек приводит к деформации приповерхностного слоя и образованию дефектов структуры в нем. При анизотропии чешуйки, равной согласно [5], 23, толщина чешуйки диаметром 0,1 мм составляет ~4 мкм. По выполненным оценкам, соответствующие толщине дефектного слоя значения $x_{0,9}$ и $x_{0,95}$ составляют сотню нанометров и эта величина значительно меньше толщины чешуек графита в модельной композиции.

Литература

1. Дмитриев, А.В. Электрофизические свойства композиции на основе природного чешуйчатого графита / А.В. Дмитриев, А.А. Ершов // Химия твердого топлива. – 2011. – № 6. – С. 47–54.
2. Лаврентьев, М.А. Методы теории функций комплексного переменного / М.А. Лаврентьев, Б.В. Шабат. – М.: Наука, 1973. – 212 с.
3. Ершов, А.А. Асимптотика решения уравнения Лапласа со смешанными условиями на границе / А.А. Ершов // Журнал вычислительной математики и уравнений математической физики. – 2011. – Т. 51, № 6. – С. 1064–1080.
4. Хольм, Р. Электрические контакты / Р. Хольм. – М.: Иностранная литература, 1961. – 464 с.
5. Дмитриев, А.В. Научные основы разработки способов снижения удельного электрического сопротивления графитированных электродов / А.В. Дмитриев. – Челябинск: ЧГПУ, 2005. – 197 с.
6. Ильин, А.М. Асимптотические методы в анализе / А.М. Ильин, А.Р. Данилин. – М.: Физматлит, 2008. – 248 с.
7. Бейтман, Г. Высшие трансцендентные функции / Г. Бейтман, А. Эрдейн. – М.: Наука, 1974. – 295 с.

Поступила в редакцию 11 декабря 2014 г.

**THE ANALYSIS OF ENERGY ABSORPTION IN A BLANKET
FOR CONTACT ELECTRIC RESISTANCE****A.V. Dmitriev¹, A.A. Ershov²**

The authors investigate peculiarities of the dissipation of electric energy at the point contacts between the graphite flakes in a composition based on it. The analysis reveals the surface layer on the surface of the graphite flake and carries out the calculation of the proportion of the output electrical energy. The calculations are performed in the two-dimensional approximation at the location of contacts with the current flowing across and along one of the flat faces of the plate. The sizes of plate conductors and electrical crosssection of the electrical spots of contacts between them have been used as parameters. The authors have discovered the analytical dependences of the layer thickness of x_p with a predetermined proportion of the energy dissipation of p of the crosssection contacts of 2ε tending to zero. The authors have used boundary value problems as an elliptic function for the normal derivative. The general solution is obtained using the Fourier expansion of the Bessel functions, special cases are performed at the location of contact on the opposite side of the base and in the end sections. The method of asymptotic expansions is used as the solution. For all three cases, the thickness of x_p is expressed through the multiplication of the power function of the proportion of crosssection of contact in the face area and exponentially dependent on the p factor. The value of p linearly enters the index grade-dependence. The asymptotical analysis of the thickness of the layer with the release of 50, 90 and 95 % of the electrical energy for the particular case is carried out. The compensation for the calculation of the conditions under which the grid method is not applicable is given. The value of $x_{0,5}$ and the thickness of the surface layer in which 50 % of the energy is dissipated by the order of magnitude thinner than the thickness of the natural graphite flakes are shown. When the defect layer is formed it determines the properties of the electrical contacts in the composition of natural flake graphite with non-conductive binder. It characterizes the contact electrical resistance at the pressing point contacts.

Keywords: boundary value problem; lamellar crystal of graphite; asymptotic decomposition; small parameter; thickness of a defective layer; composite material; network of resistance; chain model; prevalence of contact electric resistance.

References

1. Dmitriev A.V., Ershov A.A. *Khimiya tverdogo topliva*. 2011. no. 6. pp. 47–54. (in Russ.).
2. Lavrent'ev M.A., Shabat B.V. *Metody teorii funktsiy kompleksnogo peremennogo* (Methods of the theory of functions of a complex variable). Moscow, Nauka Publ., 1973. 212 p. (in Russ.).
3. Ershov A.A. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i uravneniy matematicheskoy fiziki*. 2011. Vol. 51, no. 6. pp. 1064–1080. (in Russ.).
4. Khol'm R. *Elektricheskie kontakty* (Electrical contacts). Moscow, Inostrannaya literatura Publ., 1961. 464 p. (in Russ.).
5. Dmitriev A.V. *Nauchnye osnovy razrabotki sposobov snizheniya udel'nogo elektricheskogo soprotivleniya grafitirovannykh elektrodov* (The scientific basis for the development of ways to reduce electrical resistivity of graphite electrodes). Chelyabinsk, ChGPU Publ., 2005. 197 p. (in Russ.).
6. Il'in A.M., Danilin A.R. *Asimptoticheskie metody v analize* (Asymptotic methods in the analysis). Moscow, Fizmatlit Publ., 2008. 248 p. (in Russ.).
7. Beytman G., Erdeyn A. *Vysshie transtsendentnye funktsii* (Higher transcendental functions). Moscow, Nauka Publ., 1974. 295 p. (in Russ.).

Received 11 December 2014

¹ Dmitriev Anton Vladimirovich is Cand. Sc. (Engineering), Lecturer, Chemistry of a Firm Body and Nanoprocesses Department, Chelyabinsk State University.

E-mail: admittiev@csu.ru

² Ershov Aleksandr Anatol'evich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Calculus Mathematics Department, Chelyabinsk State University.

E-mail: ale10919@yandex.ru

ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТИ МЕТОДА, ОСНОВАННОГО НА ОБОБЩЕННОМ ПРИНЦИПЕ НЕВЯЗКИ, ДЛЯ ЗАДАЧИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ СПЕКТРАЛЬНОЙ ПЛОТНОСТИ КРИСТАЛЛОВ

А.А. Ершова¹, А.И. Сидикова²

Изучена задача определения фононного спектра кристалла по его теплоемкости. Получена оценка точности метода регуляризации А.Н. Тихонова с параметром регуляризации, выбранным из обобщенного принципа невязки.

Ключевые слова: регуляризация; модуль непрерывности; оценка погрешности; некорректная задача; обобщенный принцип невязки.

Введение

Задача определения фононного спектра по его теплоемкости, зависящей от температуры, следуя [1], сводится к интегральному уравнению первого рода. Дополнительная трудность данной задачи заключается в том, что фононный спектр имеет несколько локальных максимумов, которые определяют многие физические свойства кристаллов. Поэтому они должны быть восстановлены.

В работе [2] была получена оценка погрешности приближенного решения. Но в ней не была учтена погрешность дискретизации. В данной работе для выбора параметра регуляризации использовался обобщенный принцип невязки и получена оценка погрешности приближенного решения, учитывающая дискретизацию задачи. Для этого пользовалась техника работы [3].

1. Постановка задачи

Связь энергетического спектра бозе-системы с ее теплоемкостью, зависящей от температуры, описывается интегральным уравнением первого рода

$$Sn(s) = \int_a^b K(s,t)n(s)ds = \frac{f(t)}{t}; 0 < t \leq \infty, \quad (1)$$

где $K(s,t) = \frac{s^2}{2t^3 \operatorname{sh}^2\left(\frac{s}{2t}\right)}$, $n(s) \in L_2[a,b]$, $\frac{f(t)}{t} \in L_2(0,\infty)$, $n(s)$ – спектральная плотность кристалла,

а $f(t)$ – его теплоемкость, зависящая от температуры.

Предположим, что при $f(t) = f_0(t)$ существует точное решение $n_0(s)$ уравнения (1), которое принадлежит множеству M , где

$$M = \left\{ n(s) : n(s), n'(s) \in L_2[a,b], n(a) = 0 \right\}, \quad (2)$$

а $n'(s)$ – производная по s .

Пусть точное значение $f_0(t)$ нам неизвестно, а вместо него даны $f_\delta(t) \in L_2(0,\infty)$, $\delta > 0$ такие, что

$$\left\| \frac{f_\delta(t)}{t} - \frac{f_0(t)}{t} \right\|_{L_2} < \delta.$$

Требуется по $f_\delta(t)$, δ и M определить приближенное решение $n_\delta(t)$ и оценить его отклонение от точного решения $n_0(t)$ в метрике пространства $L_2[a,b]$.

Заметим, что единственность решения уравнения (1) доказана в [4].

¹ Ершова Анна Александровна – аспирант, кафедра теории управления и оптимизации, Челябинский государственный университет.
E-mail: anya.erygina@ya.ru

² Сидикова Анна Ивановна – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра вычислительной математики, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: 7413604@mail.ru

Введем оператор B , отображающий пространство $L_2[a, b]$ в $L_2[a, b]$, формулой

$$n(s) = Bu(s) = \int_a^s u(\xi) d\xi; \quad u(s) \in L_2[a, b], Bu(s) \in L_2[a, b], \quad (3)$$

и оператор C

$$Cu(s) = ABu(s); u(s) \in L_2[a, b], Cu(s) \in L_2(0, \infty). \quad (4)$$

Из (3) и (4) следует, что

$$Cu(s) = \int_a^b P(s, t) u(s) ds, \quad (5)$$

где

$$P(s, t) = \int_b^s K(\xi, t) d\xi. \quad (6)$$

Предположим, что для численного решения уравнения (1) оператор C неудобен и требует замены его конечномерным оператором C_n , для которого известна величина h_n , определяемая соотношением

$$\|C_n - C\| \leq h_n.$$

Для определения величины h_n рассмотрим ядро интегрального оператора (1)

$$K(s, t) = \frac{s^2}{2t^3 \operatorname{sh}^2\left(\frac{s}{2t}\right)}, \quad a \leq s \leq b, 0 < t < \infty$$

и определим функцию $N(t)$ формулой

$$\max_{a \leq s \leq b} \left| \frac{s^2}{2t^3 \operatorname{sh}^2\left(\frac{s}{2t}\right)} \right| \leq \frac{b^2}{2t^3 \operatorname{sh}^2\left(\frac{a}{2t}\right)} = N(t). \quad (7)$$

Покажем, что $N(t) \in L_2(0, \infty)$.

Из непрерывности $K(s, t)$ следует непрерывность $N(t)$. Кроме того,

$$\|N(t)\|_{L_2(0, \infty)}^2 = \frac{b^4}{4} \int_0^\infty \frac{1}{t^6 \operatorname{sh}^4\left(\frac{a}{2t}\right)} dt.$$

При $t \rightarrow \infty$, $N^2(t) \sim \left(\frac{\sqrt{2}b}{a}\right)^4 \frac{1}{t^2}$, а при $t \rightarrow 0$, $N(t) \rightarrow 0$. Таким образом, $N(t) \in L_2(0, \infty)$.

Для определения оператора C_n разобьем отрезок $[a, b]$ на n равных частей и введем функции $\bar{P}_i(t), P_n(s, t)$ формулами

$$\bar{P}_i(t) = P(\bar{s}_i, t), \quad (8)$$

где $\bar{s}_i = \frac{s_i + s_{i+1}}{2}$, $s_{i+1} = a + \frac{(i+1)(b-a)}{n}$, $s_i = a + \frac{i(b-a)}{n}$, $i = 0, 1 \dots n-1$,

а

$$P_n(s, t) = \bar{P}_i(t); \quad s_i \leq s < s_{i+1}, \quad t \in (0, \infty); \quad i = 0, 1 \dots n-1. \quad (9)$$

Используя (9), определим оператор C_n формулой

$$C_n u(s) = \int_a^b P_n(s, t) u(s) ds; \quad t \in (0, \infty), \quad (10)$$

где $C_n : L_2[a, b] \rightarrow L_2(0, \infty)$.

Из (5)–(10) следует, что

$$\|C_n - C\| \leq \|N(t)\|_{L_2} \frac{(b-a)^{\frac{3}{2}}}{n} = h_n. \quad (11)$$

2. Обобщенный принцип невязки

Для решения уравнения (1) воспользуемся методом регуляризации А.Н. Тихонова первого порядка

$$\inf \left\{ \left\| C_n u(s) - \frac{f_\delta(t)}{t} \right\|^2 + \alpha \int_a^b |u(s)|^2 ds : u(s) \in L_2[a, b] \right\}, \alpha > 0. \quad (12)$$

Из [5] следует существование и единственность решения $u_{\delta h_n}^\alpha(s)$ вариационной задачи (12).

Обозначим через $\bar{f}_{\delta, n}(t)$ функцию, принадлежащую пространству $L_2(0, \infty)$, и определяемую формулой

$$\bar{f}_{\delta, n}(t) = pr \left[\frac{f_\delta(t)}{t}; R(C_n) \right], \quad (13)$$

то есть являющуюся метрической проекцией в пространстве $L_2(0, \infty)$ функции $\frac{f_\delta(t)}{t}$ на множество значений оператора C_n .

Значение параметра регуляризации $\bar{\alpha} = \bar{\alpha}(C_n, f_\delta(t), h_n, \delta)$ в задаче (12) выберем из обобщенного принципа невязки [4]

$$\left\| C_n u_{\delta h_n}^\alpha(s) - \bar{f}_{\delta, n}(t) \right\| = \left\| u_{\delta h_n}^\alpha(t) \right\| h_n + \delta. \quad (14)$$

Известно, что при условии $\left\| \bar{f}_{\delta, n}(t) \right\| > \delta + \left\| n'_0(s) \right\| h_n$ существует единственное решение $\bar{\alpha}(C_n, f_\delta(t), h_n, \delta)$ уравнения (14).

Если решение $u_{\delta h_n}^{\bar{\alpha}(C_n, f_\delta(t), h_n, \delta)}(s)$ задачи (12), (14) обозначить через $u_{\delta h_n}(s)$, то приближенное решение $n_{\delta h_n}(s)$ уравнения (1) будет иметь вид

$$n_{\delta h_n}(s) = B u_{\delta h_n}(s). \quad (15)$$

Из (8)–(10) следует, что

$$C_n u(s) = \sum_{i=0}^{n-1} \bar{P}_i(t) \int_{s_i}^{s_{i+1}} u(s) ds. \quad (16)$$

Так как

$$\int_{s_i}^{s_{i+1}} u(s) ds = \sqrt{\frac{b-a}{n}} u_i, \quad (17)$$

где

$$u_i = \sqrt{\frac{n}{(b-a)}} \int_{s_i}^{s_{i+1}} u(s) ds, \quad (18)$$

то из (16) и (17) следует, что

$$C_n u(s) = \sqrt{\frac{b-a}{n}} \sum_{i=0}^{n-1} \bar{P}_i(t) u_i. \quad (19)$$

Пусть $X_n \subset L_2[a, b]$ и является подпространством кусочно-постоянных функций $\varphi(s)$

$$\varphi(s) = \{c_i : s_i \leq s < s_{i+1}, i = 0, 1 \dots n-1\}. \quad (20)$$

Математика

В качестве базиса, определяющего пространство X_n , рассмотрим систему функций $\{e_i\}$, $i = 0, 1, \dots, n-1$

$$e_i(s) = \begin{cases} 1; & s_i \leq s < s_{i+1} \\ 0; & s \notin [s_i, s_{i+1}), \end{cases} \quad i = 0, 1, \dots, n-1. \quad (21)$$

После нормировки система (21) примет вид

$$\varphi_i(s) = \begin{cases} \sqrt{\frac{n}{b-a}}; & s_i \leq s < s_{i+1} \\ 0; & s \notin [s_i, s_{i+1}). \end{cases} \quad (22)$$

Теперь наряду с задачей (12) рассмотрим задачу

$$\inf \left\{ \left\| C_n \hat{u}(s) - \frac{f_\delta(t)}{t} \right\|^2 + \alpha \|\hat{u}(s)\|^2; \hat{u}(s) \in X_n \right\}. \quad (23)$$

Теорема 1. Вариационная задача (12) и (23) эквивалентны. Доказательство приведено в [3].

Рассмотрим задачу

$$\inf \left\{ \int_0^\infty \left[\sqrt{\frac{b-a}{n}} \sum_{i=0}^{n-1} \bar{P}_i(t) u_i - \frac{C_\delta(t)}{t} \right]^2 dt + \alpha \sum_{j=0}^{n-1} u_j^2; u_j \in R_n \right\}. \quad (24)$$

Из [5] следует, что для любого $\alpha > 0$ существует единственное решение $(\bar{u}_i^\alpha) \in R^n$.

Кроме того, задача (24) эквивалентна системе линейных алгебраических уравнений

$$\sqrt{\frac{b-a}{n}} \sum_{i=0}^n b_{ij} u_i + \alpha u_j = g_j; \quad j = 0, 1, \dots, n-1, \quad (25)$$

где $b_{ij} = \int_0^\infty \bar{P}_i(t) \bar{P}_j(t) dt$, $g_j = \sqrt{\frac{b-a}{n}} \int_0^\infty \bar{P}_j(t) \frac{C_\delta(t)}{t} dt$.

Теорема 2. Пусть $\bar{u}_{\delta,n}^\alpha$ и \bar{u}_i^α – решение задачи (23) и (24), соответственно. Тогда эти решения связаны соотношением

$$\bar{u}_{\delta,n}^\alpha = \sum_{i=0}^{n-1} \bar{u}_i^\alpha \varphi_i(s).$$

Так как из теорем 1 и 2 будет следовать, что вариационная задача (12) сведена к системе линейных алгебраических уравнений (25), то, решив последнюю, получим $(\bar{u}_i^\alpha) \in R^n$. Тогда для определения параметра регуляризации $\bar{\alpha}(C_n, f_\delta(t), h_n, \delta)$ в этом решении воспользуемся уравнением (14), которое в R^n примет вид

$$\left\{ \int_0^\infty \left[\sqrt{\frac{b-a}{n}} \sum_{i=0}^{n-1} \bar{P}_i(t) \bar{u}_i^\alpha - \frac{C_{\delta,n}(t)}{t} \right]^2 dt \right\}^{\frac{1}{2}} = \left[\sum_{i=0}^{n-1} (\bar{u}_i^\alpha)^2 \right]^{\frac{1}{2}} h_n + \delta. \quad (26)$$

При условии

$$\left\| \frac{\bar{f}_{\delta,n}(t)}{t} \right\| > \delta + \|n_0'(s)\| h_n$$

существует единственное решение $\bar{\alpha}(C_n, f_\delta(t), h_n, \delta)$ уравнения (26).

Окончательно приближенное решение $n_{\delta h_n}(s)$ уравнения (1) будет иметь вид

$$n_{\delta h_n}(s) = \sum_{i=0}^{n-1} \bar{u}_i^{\bar{\alpha}} \varphi_i(s), \quad (27)$$

где $\bar{\alpha} = \bar{\alpha}(C_n, f_\delta(t), h_n, \delta)$.

3. Оценка погрешности приближенного решения уравнения (1)

Рассмотрим две вариационные задачи, приведенных в [6] и [7]

$$\inf \left\{ \|u(s)\|^2 : u(s) \in L_2[a, b], \|C_n u(s) - \bar{f}_{\delta, n}(t)\| \leq \delta + \|u(s)\| h_n \right\} \quad (28)$$

и

$$\inf \left\{ \|u(s)\|^2 : u(s) \in L_2[a, b], \|C_n u(s) - \bar{f}_{\delta, n}(t)\| \leq \delta + \tau h_n \right\}, \quad (29)$$

где $0 \leq \tau \leq \frac{\|\bar{f}_{\delta, n}(t)\| - \delta}{h_n}$.

Из теоремы, доказанной в [7], следует, что выполнение условия $\|\bar{f}_{\delta, n}(t)\| > \delta + \tau h_n$ влечет существование и единственность решения $u_{\delta h_n}^\tau(s)$ вариационной задачи (29).

Теперь запишем уравнение

$$\left\| u_{\delta h_n}^\tau(s) \right\| = \tau. \quad (31)$$

Теорема 3. Пусть $\|\bar{f}_{\delta, n}(t)\| > \delta + \|n'_0(s)\| h_n$, тогда вариационная задача (28) эквивалентна задачам (30) и (31). Доказательство приведено в [8].

Теорема 4. Пусть $\|\bar{f}_{\delta, n}(t)\| > \delta + \|n'_0(s)\| h_n$, тогда вариационная задача (28) эквивалентна задаче (12) с параметром α , выбранным из уравнения (14). Доказательство приведено в [8].

Перейдем к оценке погрешности приближенного решения в метрике пространства $L_2[a, b]$.

Введем функцию $\omega(\sigma, r)$, $\sigma, r > 0$ формулой

$$\omega(\sigma, r) = \sup_n \left\{ \|n(s)\|_{L_2} : n(s) \in M_r, \|Sn(s)\| \leq \sigma \right\},$$

где $M_r = B\bar{S}_r$, а S определен (1).

Теорема 5. Пусть $n_0(s) \in M$, а $n_{\delta h_n}(s)$ определена формулой (15) и $\|\bar{f}_{\delta, n}(t)\| > \delta + \|n'_0(s)\| h_n$. Тогда существует число $r > 0$, такое, что

$$\|n_{\delta h_n}(s) - n_0(s)\|_{L_2[a, b]} \leq 2\omega(\delta + 2rh_n, r).$$

Доказательство приведено в [3].

В работе [2] было получено, что

$$\omega(\sigma, r) \leq r \left(1 + \frac{1}{\pi} \ln^2 \left(\frac{r}{4\delta} \right) \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (32)$$

Для приближенного решения $u_{\delta h_n}(t)$, определенного (15), имеет место оценка

$$\|n_{\delta h_n}(s) - n_0(s)\|_{L_2[a, b]} \leq 2r \left(1 + \frac{1}{\pi} \ln^2 \left(\frac{r}{4(\delta + 2rh_n)} \right) \right)^{\frac{1}{2}},$$

где $n_{\delta h_n}(s)$ – приближенное решение уравнения (1), определенное (26).

Литература

1. Лифшиц, И.М. Об определении энергетического спектра бозе-системы по ее теплоемкости / И.М. Лифшиц // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1954. – Т. 26, № 5. – С. 551–556.

2. Танана, В.П. Оценка погрешности метода регуляризации Тихонова при решении одной обратной задачи физики твердого тела / В.П. Танана, А.А. Ерыгина // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2014. – Т. 17, № 2(58). – С. 125–136.

3. Танана, В.П. Об оценке погрешности регуляризующего алгоритма, основанного на обобщенном методе невязки, при решении интегральных уравнений / В.П. Танана, А.И. Сидикова, Е.Ю. Вишняков // Вестник ЮУрГУ. Серия: Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника. – 2014. – Т. 14, № 4. – С. 59–64.

4. Танана, В.П. О единственности решения обратной задачи определения фононных спектров кристаллов / В.П. Танана, В.В. Бояршинов // Деп. в ВИНТИ. – 1987. – 892 – В87.

5. Тихонов, А.Н. О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации / А.Н. Тихонов // Докл. АН СССР. – 1963. – Т. 151, № 3. – С. 501–504.

6. Гончарский, А.В. Обобщенный принцип невязки / А.В. Гончарский, А.С. Леонов, А.Г. Ягола // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1973. – Т. 13, № 2. – С. 294–302.

7. Танана, В.П. Об одном проекционно-интерактивном алгоритме для операторных уравнений I рода / В.П. Танана // Докл. АН СССР. – 1975. – Т. 224, № 15. – С. 1025–1029.

8. Танана, В.П. Методы решения операторных уравнений / В.П. Танана. – М.: Наука, 1981. – 156 с.

Поступила в редакцию 11 декабря 2014 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2015, vol. 7, no. 2, pp. 25–30*

UNCERTAINTY ESTIMATION OF THE METHOD BASED ON GENERALIZED RESIDUAL PRINCIPLE FOR THE RESTORE TASK OF THE SPECTRAL DENSITY OF CRYSTALS

A.A. Ershova¹, A.I. Sidikova²

The article studies the task of identification of phonon spectrum of a crystal according to its hit capacity. The authors reveal the evaluation of accuracy of Tikhonov regularization method with regularization parameter which was chosen from generalized residual principle.

Keywords: regularization; module of continuity; uncertainty estimation; ill-conditioned task; generalized residual principle.

References

1. Lifshits I.M. *Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki*. 1954. Vol. 26, Issue 5. pp. 551–556. (in Russ.).

2. Tanana V.P., Erygina A.A. *Sibirskiy zhurnal industrial'noy matematiki*. 2014. Vol. 17, no. 2(58). pp. 125–136. (in Russ.).

3. Tanana V.P., Sidikova A.I., Vishnyakov E.Yu. Ob otsenke pogreshnosti regulyaryzuyushchego algoritma, osnovannogo na obobshchenom metode nevyazki, pri reshenii integral'nykh uravneniy (On Error Estimates for Regularizing Algorithm Based on Generalized Residual Method when Solving Integral Equations). *Bulletin of South Ural State University. Series of "Computer Technologies, Automatic Control & Radioelectronics"*. 2014. Vol. 14, no. 4. pp. 59–64. (in Russ.).

4. Tanana V.P., Boyarshinov V.V. *Dep. v VINITI*. 1987. 892.V87. (in Russ.).

5. Tikhonov A.N. *Dokl. AN SSSR*. 1963. Vol. 151, no. 3. pp. 501–504. (in Russ.).

6. Goncharskiy A.V., Leonov A.S., Yagola A.G. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki*. 1973. Vol. 13, no. 2. pp. 294–302. (in Russ.).

7. Tanana V.P. *Dokl. AN SSSR*. 1975. Vol. 224, no. 15. pp. 1025–1029. (in Russ.).

8. Tanana V.P. *Metody resheniya operatornykh uravneniy* (Methods of solution of operator equations). Moscow, Nauka Publ., 1981. 156 p. (in Russ.).

Received 11 December 2014

¹ Ershova Anna Aleksandrovna is Post-graduate Student, Department of Theory of Management and Optimization, Chelyabinsk State University.

E-mail: anya.erygina@ya.ru

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

E-mail: 7413604@mail.ru

ЗАДАЧИ КОШИ И ГУРСА ДЛЯ УРАВНЕНИЯ 3-ГО ПОРЯДКА

В.В. Карачик¹

Рассматриваются задачи Коши и Гурса для гиперболического уравнения 3-го порядка. Доказана теорема существования функции Римана и на основе этого построены решения задач Коши и Гурса.

Ключевые слова: задача Коши; задача Гурса; гиперболическое уравнение 3-го порядка; функция Римана.

Введение

Рассмотрим уравнение третьего порядка следующего вида

$$\mathcal{L}(D)u(x) \equiv D_x^{(3)}u + \sum_{i=1}^3 a_i(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} + c(x)u = f(x), \quad x \in G, \quad (1)$$

где $x = (x_1, x_2, x_3)$, $D_x^{(3)} = \partial^3 / \partial x_1 \partial x_2 \partial x_3$, $f \in C(\bar{G})$, а необходимая гладкость коэффициентов и область G будут конкретизированы ниже. Очевидно, что характеристиками уравнения (1) являются плоскости $x_i = \text{const}$. Введем следующие обозначения. Пусть $\sigma(x) = 0$ – некоторая поверхность в \mathbb{R}^3 класса C^4 и $x^0 \in \mathbb{R}^3$. Область, ограниченную поверхностью $\sigma(x) = 0$ и плоскостями $x_i = x_i^0$, $i = 1, 2, 3$, обозначим через G , а пересечение \bar{G} с этими плоскостями через S_i . Пусть также $\tau_i = \sigma \cap S_i$. Вектор, получающийся из вектора x отбрасыванием i -ой компоненты, обозначим $x_{(i)}$. Исследуем для уравнения (1) следующие задачи.

Задача Коши. Найти функцию $u(x)$, такую, что $u \in C^2(\bar{G})$ и $D_x^{(3)}u \in C(G)$, удовлетворяющую уравнению (1) и следующим условиям

$$\frac{\partial^k u}{\partial l^k} \Big|_{\sigma} = \varphi_k(s), \quad s \in \sigma, \quad k = \overline{0, 2}, \quad (2)$$

где $l \in \mathbb{R}^3$, $\|l\| = 1$, $l(x) \in C^3(\sigma)$.

Рассмотрим область $\mathcal{D} = \{x \in \mathbb{R}^3 : x_i^0 < x_i < x_i^1, i = \overline{1, 3}\}$. Пусть $S_i(x^k) = \bar{\mathcal{D}} \cap \{x_i = x_i^k\}$, где $k = 0, 1$. В соответствии с предыдущими обозначениями $S_i = S_i(x^0)$, $\sigma = \bigcup_{i=1}^3 S_i(x^1)$.

Задача Гурса. Найти функцию $u(x)$, такую, что $u \in C^1(\bar{\mathcal{D}})$ и $D_{x_{(i)}}^{(2)}u \in C(\bar{\mathcal{D}})$, $D_x^{(3)}u \in C(\mathcal{D})$, удовлетворяющую уравнению (1) и следующим условиям

$$u(x) \Big|_{S_i(x^0)} = \varphi_i(x_{(i)}), \quad i = 1, 2, 3. \quad (3)$$

Функцию $u(x)$, если она существует, будем называть регулярным решением сформулированных задач. Уравнения, содержащие операторы вида $D_x^{(n)}$, и их итерации принято называть в литературе уравнениями Манжерона. Если $a_i = 0$, $i = \overline{1, 3}$, $c(x) = \text{const}$, то решение задачи Гурса получено, как пример, в [1]. В данной постановке задача Гурса рассматривалась также в [2, 3]. В [2] исследовалось существование решения, а в [3] строилась функция Римана. Путем применения методики исследования задач Коши и Гурса для уравнений 2-го порядка гиперболического типа, изложенной в [4, 5], получим условия разрешимости сформулированных задач.

1. Функция Римана

Введем оператор $\mathcal{L}^*(D)$, сопряженный с $\mathcal{L}(D)$:

¹ Карачик Валерий Валентинович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра математического и функционального анализа, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: karachik@susu.ru

$$\mathcal{L}^*(D)v(x) \equiv D_x^{(3)}v(x) + \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_i} (a_i(x)v(x)) - c(x)v(x). \quad (4)$$

Очевидно, что оператор $\mathcal{L}^*(D)$ определен на функциях $v(x)$, имеющих следующую гладкость: $v \in C^1(\overline{D})$, $D_{x(i)}^{(2)}v \in C(\overline{D})$ и $D_x^{(3)}v \in C(D)$. Обозначим через x_k и x_j первую и вторую компоненты вектора $x_{(i)}$.

Определение. Назовем функцией Римана уравнения (1) функцию, являющуюся регулярным решением следующей задачи

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^*(D)v(x) &= 0, \quad x \in D, \\ v(x)|_{x_i=x_i^1} &= w_i(x_{(i)}), \quad i = \overline{1,3}, \end{aligned} \quad (5)$$

где функция $w_i(x_{(i)})$ удовлетворяет условиям

$$\begin{aligned} D_{x(i)}^{(2)}w_i(x_{(i)}) + a_i(x)|_{x_i=x_i^1}w_i(x_{(i)}) &= 0, \quad x_{(i)} \in S_i(x^1), \\ w_i(x_{(i)})|_{x_s=x_s^1} &= 1, \quad s = k, j, \quad x_s^0 < x_s < x_s^1. \end{aligned} \quad (6)$$

Обозначим функцию Римана уравнения (1) через R . Очевидно, что $R = R(x, x^1)$.

Теорема 1. Пусть выполнены условия $c, a, \partial a_i / \partial x_i \in C(\overline{D})$. Тогда функция Римана уравнения (1) существует и единственна.

Доказательство. Пусть решение задачи (3)–(4) – функция $R(x, x^1)$ существует. Тогда, применяя к уравнению $\mathcal{L}^*(D)R(x, x^1) = 0$ оператор $\int_x^{x^1} \cdot d\xi$, где $x \in D$, получим

$$\begin{aligned} R(x, x^1) - \sum_{i=1}^3 \left(R(x|_{x_i^1=x_i}, x^1) - R(x|_{x_i=x_i^1}, x^1) \right) - R(x, x^1) + \\ + \sum_{i=1}^3 \int_{x(i)}^{x(i)^1} \left(a_i(\xi)R(\xi|_{\xi_i=x_i^1}, x^1) - a_i(\xi)R(\xi|_{\xi_i=x_i}, x^1) \right) d\xi_{(i)} - \int_x^{x^1} c(\xi)R(\xi, x^1) d\xi = 0. \end{aligned}$$

Здесь и в дальнейшем под выражением вида $a(\xi)R(\xi|_{\xi_i=x_i}, y)$ будем понимать следующее выражение $a(x_1, \xi_2, \xi_3)R(x_1, \xi_2, \xi_3; y_1, y_2, y_3)$. Учитывая условия (6), налагаемые на граничные функции задачи (5), найдем

$$R(x, x^1) = \sum_{i=1}^3 w_i(x_{(i)}) - 2 + \sum_{i=1}^3 \int_{x(i)}^{x(i)^1} \left(a_i(\xi)|_{\xi_i=x_i} w_i(x_{(i)}) - a_i(\xi)R(\xi|_{\xi_i=x_i}, x^1) \right) d\xi_{(i)} - \int_x^{x^1} c(\xi)R(\xi, x^1) d\xi.$$

Нетрудно видеть, что

$$w_i(x_{(i)}) + \int_{x(i)}^{x(i)^1} a_i(\xi)|_{\xi_i=x_i} w_i(x_{(i)}) d\xi_{(i)} = 1, \quad x \in S_i, \quad i = \overline{1,3}.$$

Поэтому

$$R(x, x^1) = 1 - \sum_{i=1}^3 \int_{x(i)}^{x(i)^1} a_i(\xi)R(\xi|_{\xi_i=x_i}, x^1) d\xi_{(i)} - \int_x^{x^1} c(\xi)R(\xi, x^1) d\xi, \quad x \in \overline{D}. \quad (7)$$

Обозначая $R(x, x^1)$ через $v(x)$, запишем уравнение (7) в виде

$$v(x) = 1 - \sum_{i=1}^3 \int_{x(i)}^{x(i)^1} a_i(\xi)v(\xi)|_{\xi_i=x_i} d\xi_{(i)} - \int_x^{x^1} c(\xi)v(\xi) d\xi. \quad (8)$$

Для решения уравнения (8) воспользуемся методом последовательных приближений. Нетрудно убедиться, что $v \in C(\overline{D})$ и $v(x)$ можно записать в виде

$$v(x) = \sum_{n=1}^{\infty} (v_n(x) - v_{n-1}(x)) + v_0(x), \quad (9)$$

где $v_0(x) = 1$, а при $n \geq 1$

$$v_n(x) = 1 - \sum_{i=1}^3 \int_{x(i)}^{x^1(i)} a_i(\xi) v_{n-1}(\xi) \Big|_{\xi_i=x_i} d\xi_{(i)} - \int_x^{x^1} c(\xi) v_{n-1}(\xi) d\xi,$$

если ряд (9) равномерно сходится в области \overline{D} . Аналогичный результат получим после применения метода нормированных функций [6] к задаче (5)–(6). Оценим члены ряда (9). Пусть $|c|, |a_i| \leq M$, в области \overline{D} и $K = \max_i \{x_i^1 - x_i^0, 1\}$. Для сокращения дальнейших записей введем следующие обозначения $|x - y|_{(i)} = x_j - y_j + x_k - y_k, |x - y| = x_i - y_i + x_j - y_j + x_k - y_k$, где i, j, k различные числа, принимающие значения 1, 2, 3. Так как при $x \in \overline{D}$

$$(x_i^1 - x_i)(x_j^1 - x_j) \leq K/2 |x^1 - x|_{(k)}, (x_i^1 - x_i)(x_j^1 - x_j)(x_k^1 - x_k) \leq K^2/3 |x^1 - x|, \tag{10}$$

то для $x \in \overline{D}$ справедлива оценка

$$|v_1(x) - v_0(x)| \leq M \left((x_1^1 - x_1)(x_2^1 - x_2) + (x_2^1 - x_2)(x_3^1 - x_3) + (x_3^1 - x_3)(x_1^1 - x_1) + (x_1^1 - x_1)(x_2^1 - x_2)(x_3^1 - x_3) \right) \leq 4/3MK^2 |x^1 - x|.$$

Предположим, что для $x \in \overline{D}$ и некоторого $n \geq 1$ верно неравенство

$$|v_{n+1}(x) - v_n(x)| \leq K/3(4KM)^n |x^1 - x|^{2n-1}. \tag{11}$$

Подставляя в (11) вместо n значение $n+1$, после несложных преобразований находим

$$|v_{n+1}(x) - v_n(x)| \leq K/3(4KM)^n M \left(3|x^1 - x|^{2n+1} + |x^1 - x|^{2n+2} \right) \leq \leq K/3(4KM)^n M |x^1 - x|^{2n+1} \left(3 + |x^1 - x|/(2n+2) \right).$$

Так как $3/(2n+2) < 1$, при $n \geq 1$, то

$$|v_{n+1}(x) - v_n(x)| \leq K/3(4KM)^{n+1} |x^1 - x|^{2n+1},$$

т.е. равенство (11) справедливо для любого значения $n \geq 1$ и $x \in \overline{D}$. Применяя оценку (11) к формуле (9), убеждаемся, что функция $v(x)$ существует, непрерывна в \overline{D} и удовлетворяет неравенству

$$|v(x)| \leq 1 + 2/3\sqrt{MK^3} \operatorname{sh}(\sqrt{4MK} |x^1 - x|).$$

Докажем единственность решения уравнения (8). Пусть имеется два решения. Разность этих решений обозначим $w(x)$. Очевидно, что $w(x)$ должна удовлетворять следующему уравнению

$$w(x) = -\int_x^{x^1} c(\xi) w(\xi) d\xi - \sum_{i=1}^3 \int_{x(i)}^{x^1(i)} a_i(\xi) w(\xi) \Big|_{\xi_i=x_i} d\xi_{(i)}.$$

Учитывая сделанные выше обозначения, найдем

$$|w(x)| \leq M \left(\int_x^{x^1} |w(\xi)| d\xi + \sum_{i=1}^3 \int_{x(i)}^{x^1(i)} |w(\xi)| \Big|_{\xi_i=x_i} d\xi_{(i)} \right).$$

Из полученного неравенства при $W = \sup_{x \in \overline{D}} |w(x)|$ будем иметь $|w(x)| \leq 4/3MWK^2 |x^1 - x|$.

Используя найденное неравенство, из оценки для $w(x)$, аналогично (11), можно получить

$$|w(x)| \leq W/3(4KM)^n K |x^1 - x|^{2n-1}, \quad x \in \overline{D}.$$

Очевидно, что если $n \rightarrow \infty$, то правая часть найденного неравенства стремится к 0, а так как левая его часть не зависит от n , то $w(x) = 0$ для $x \in \overline{D}$. Что и требовалось установить.

Итак, если функция $R(x, x^1)$ существует, то ее можно найти из интегрального уравнения (7).

Если теперь мы покажем, что решение уравнения (8) имеет следующую гладкость: $v \in C^1(\overline{D})$, $D_{x(i)}^{(2)} v \in C(\overline{D})$, $D_x^{(3)} v \in C(\overline{D})$, и удовлетворяет задаче (5)–(6), то функция Римана уравнения (1) существует и единственна.

Сначала докажем, что функция $v(x)$ обладает в $\bar{\mathcal{D}}$ непрерывными производными первого порядка. Для этого исследуем дифференцируемость ряда (9), например по x_1 . Очевидно, что функции $v_n(x)$ дифференцируемы в \mathcal{D} и справедливо равенство

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_1}(v_{n+1}(x) - v_n(x)) &= -\int_{x_2}^{x_2^1} a_3(x)(v_n(x) - v_{n-1}(x))\Big|_{x_2=\xi_2} d\xi_2 - \\ &- \int_{x_3}^{x_3^1} a_2(x)(v_n(x) - v_{n-1}(x))\Big|_{x_3=\xi_3} d\xi_3 - \int_{x_2}^{x_2^1} \int_{x_3}^{x_3^1} \left(c(x) + \frac{\partial}{\partial x_1} a_1(x) \right) (v_n(x) - v_{n-1}(x))\Big|_{\substack{x_2=\xi_2 \\ x_3=\xi_3}} d\xi_3 d\xi_2 - \\ &- \int_{x_2}^{x_2^1} \int_{x_3}^{x_3^1} a_1(x) \frac{\partial}{\partial x_1} (v_n(x) - v_{n-1}(x))\Big|_{\substack{x_2=\xi_2 \\ x_3=\xi_3}} d\xi_3 d\xi_2 \end{aligned} \quad (12)$$

Пусть $M_1 = \sup_{x \in \mathcal{D}} (M, \partial a_i / \partial x_i)$, тогда, используя (10), нетрудно убедиться, что

$$\left| \frac{\partial}{\partial x_1} (v_1(x) - v_0(x)) \right| \leq M_1 \left(2(x_2^1 - x_2)(x_3^1 - x_3) + |x^1 - x|_{(1)} \right),$$

и значит

$$\left| \frac{\partial}{\partial x_1} (v_1(x) - v_0(x)) \right| \leq M_1 (K + 1) |x^1 - x|_{(1)}. \quad (13)$$

Теперь оценим $\frac{\partial}{\partial x_1} (v_{n+1}(x) - v_n(x))$. Воспользовавшись (10), найдем

$$\begin{aligned} \left| \frac{\partial}{\partial x_1} (v_{n+1}(x) - v_n(x)) \right| &\leq 2/3K(K+1)M_1(4KM_1)^n |x^1 - x|^{2n,1} + \\ &+ M_1 \int_{x_2}^{x_2^1} \int_{x_3}^{x_3^1} \left| \frac{\partial}{\partial x_1} (v_n - v_{n-1}) \right| d\xi_3 d\xi_2. \end{aligned} \quad (14)$$

Отсюда нетрудно получить цепочку неравенств

$$\begin{aligned} \left| \frac{\partial}{\partial x_1} (v_{n+1}(x) - v_n(x)) \right| &\leq 2/3K(K+1)M_1(4KM_1)^n |x^1 - x|^{2n,1} + \\ &+ 2/3K(K+1)M_1^2(4KM_1)^{n-1} \int_{x_2}^{x_2^1} \int_{x_3}^{x_3^1} \left(|x^1 - x|_{(3)} + x_3^1 - \xi_3 \right)^{2n-2,1} d\xi_3 d\xi_2 + \\ &+ M_1^2 \int_{x_2}^{x_2^1} \int_{x_3}^{x_3^1} \int_{\xi_2}^{x_2^1} \int_{\xi_3}^{x_3^1} \left| \frac{\partial}{\partial x_1} (v_{n-1} - v_{n-2}) \right| d\tau_3 d\tau_2 d\xi_3 d\xi_2 \leq 4/3K(K+1)M_1(4KM_1)^n |x^1 - x|^{2n,1} + \\ &+ M_1^2 \int_{x_2}^{x_2^1} \int_{x_3}^{x_3^1} \int_{\xi_2}^{x_2^1} \int_{\xi_3}^{x_3^1} \left| \frac{\partial}{\partial x_1} (v_{n-1} - v_{n-2}) \right| d\tau_3 d\tau_2 d\xi_3 d\xi_2. \end{aligned}$$

Если данный процесс повторить $n - 2$ раз и использовать неравенство (13), то получим

$$\left| \frac{\partial}{\partial x_1} (v_{n+1}(x) - v_n(x)) \right| \leq 2/3nK(K+1)M_1(4KM_1)^n |x^1 - x|^{2n,1} + (K+1)M_1^{n+1} |x^1 - x|_{(1)}^{2n+1,1}.$$

Следовательно, если ряд (9) продифференцировать по x_1 , то полученный таким образом ряд будет равномерно сходиться в области $\bar{\mathcal{D}}$. Значит, по известной теореме сумма ряда (9) – дифференцируемая по x_1 в области \mathcal{D} функция. Аналогичное утверждение можно сделать и относительно переменных x_2 и x_3 . Итак, $v \in C^1(\mathcal{D})$. Очевидно, что более этого, $v \in C^1(\bar{\mathcal{D}})$.

Исследуем возможность применения операторов $D_{x(i)}^{(2)}$ и $D_x^{(3)}$ к функции $v(x)$ в области \mathcal{D} . Легко видеть, что правая часть уравнения (8) допускает применение к ней операторов $D_{x(i)}^{(2)}$ при

$i = \overline{1, 3}$, а также оператора $D_x^{(3)}$, и полученные в результате этого функции будут непрерывны в $\overline{\mathcal{D}}$. Поэтому $D_{x(i)}^{(2)}v, D_x^{(3)}v \in C(\overline{\mathcal{D}})$. Далее нетрудно подсчитать, что

$$D_{x(i)}^{(2)}v + a_i v = \int_{x_i}^{x_i^1} \left(\sum_{j \neq i} (a_j v)_{x_j} - cv \right) d\xi_i, \tag{15}$$

а значит

$$D_{x(i)}^{(2)}v + a_i v|_{x_i=x_i^1} = 0, x \in S_i.$$

Поскольку кроме этого $v|_{x_i=x_i^1} = 1$ для $i, j = \overline{1, 3}$ ($i \neq j$) и $D_{x(i)}^{(2)}v \in C(\overline{\mathcal{D}})$, то функции $w_i(x_{(i)}) = v(x)|_{x_i=x_i^1}$ удовлетворяют условиям (6). Для окончательного доказательства теоремы подействуем на равенство (15) оператором D_{x_i} . Получим $\mathcal{L}^*(D)v(x) = 0$. Итак, функция $v(x)$, найденная из (8), удовлетворяет задаче (5)–(6). Теорема доказана.

Замечание 1. Если $c, a_i \in C^1(\overline{\mathcal{D}})$, $\partial^2 a_i / \partial x_i^2 \in C(\overline{\mathcal{D}})$, тогда функция Римана дважды дифференцируема и $R_{x_i x_j}(x, x^1) \in C(\overline{\mathcal{D}})$.

Исследуем теперь свойства функции $U(x) = R(x^0, x)$.

Теорема 2. Пусть коэффициенты уравнения (1) обладают гладкостью, требуемой в теореме 1. Тогда $U(x)$ имеет следующую гладкость: $U \in C^1(\overline{\mathcal{D}})$, $D_{x(i)}^{(2)}U \in C(\overline{\mathcal{D}})$, $D_x^{(3)}U \in C(\mathcal{D})$, а также удовлетворяет однородному уравнению (1) и условиям (6)

$$\begin{aligned} D_{x(i)}^{(2)}w_i(x_{(i)}) + a_i(x)|_{x_i=x_i^0} w_i(x_{(i)}) &= 0, x_{(i)} \in S_i(x^0), \\ w_i(x_{(i)})|_{x_s=x_s^0} &= 1, s = k, j, x_s^0 < x_s < x_s^1, \end{aligned} \tag{16}$$

где $w_i(x_{(i)}) = U(x)|_{x_i=x_i^0}$.

Доказательство. Положим $x = x^0$ и $x^1 = x$ в уравнении (7). Его решение представляется рядом (9), который перепишем в виде

$$U(x) = \sum_{n=0}^{\infty} U_n(x, x^0), \quad x \in \overline{\mathcal{D}}, \tag{17}$$

где $U_0(x, x^0) = 1$, а при $n \geq 1$

$$U_n(x, x^0) = -\int_x^{x^1} c(\xi)U_{n-1}(x, \xi)d\xi - \sum_{i=1}^3 \int_{x(i)^0}^{x(i)} a_i(\xi)U_{n-1}(x, \xi)|_{\xi_i=x_i^0} d\xi_{(i)}. \tag{18}$$

Пусть $U_n(x, x^0)$ обладает гладкостью, требуемой в теореме 2 от функции $U(x)$. Тогда из формулы (18) сразу следует, что $U_{n+1}(x, x^0)$ также обладает этой же гладкостью. Это видно из того, что порядок производных справа от $U_n(x, x^0)$ не может быть выше порядка производных слева от $U_{n+1}(x, x^0)$. Оценим члены ряда (17). Из (11) следует, что

$$|U_n(x, x^0)| \leq \frac{(36Mk^3)^n}{9(2n-1)!},$$

если $|x_i - x_i^0| \leq k$, $|a_i|, |c| \leq M$. Аналогичные оценки имеют место и для $D_{x_i}U_n$, $D_{x(i)}^{(2)}U_n$, $D_x^{(3)}U_n$. Значит, сумма ряда (17) обладает гладкостью, требуемой от функции $U(x)$. Положим в формуле (18) $x_i = x_i^0$. Тогда, обозначая $U_n(x)|_{x_i=x_i^0} = \tilde{w}_n(x_{(i)}, x^0)$ будем иметь

$$\tilde{w}_n(x_{(i)}, x^0) = -\int_{x(i)^0}^{x(i)} a_i(\xi)\tilde{w}_{n-1}(x_{(i)}, \xi)|_{\xi_i=x_i^0} d\xi_{(i)}. \tag{19}$$

Математика

Положим $x_j = x_j^0$, для $j \neq i$. Тогда $\tilde{w}_n(x_{(i)}, x^0)|_{x_j=x_j^0} = 0$ для $n \geq 1$. Значит, $w_i(x_{(i)})|_{x_j=x_j^0} = 1$. Подействуем на равенство (19) оператором D_{x_j} при $j \neq i$. Если $n \geq 1$, будем иметь

$$D_{x_j} \tilde{w}_n(x_{(i)}, x^0) = - \int_{x_k^0}^{x_k} a_i(\xi) \tilde{w}_{n-1}(x_{(i)}, \xi) \Big|_{\substack{\xi_i=x_i^0 \\ \xi_j=x_j}} d\xi_k - \int_{x_{(i)}^0}^{x_{(i)}} a_i(\xi) D_{x_j} \tilde{w}_{n-1}(x_{(i)}, \xi) \Big|_{\xi_i=x_i^0} d\xi_{(i)},$$

или при $n \geq 2$

$$D_{x_j} \tilde{w}_n(x_{(i)}, x^0) = - \int_{x_{(i)}^0}^{x_{(i)}} a_i(\xi) D_{x_j} \tilde{w}_{n-1}(x_{(i)}, \xi) \Big|_{\xi_i=x_i^0} d\xi_{(i)}.$$

Действуя на полученное равенство оператором D_{x_k} , найдем

$$D_{x_{(i)}}^{(2)} \tilde{w}_n(x_{(i)}, x^0) = - \int_{x_{(i)}^0}^{x_{(i)}} a_i(\xi) D_{x_{(i)}}^{(2)} \tilde{w}_{n-1}(x_{(i)}, \xi) \Big|_{\xi_i=x_i^0} d\xi_{(i)}. \quad (20)$$

Если $n = 1$, то будем иметь $D_{x_{(i)}}^{(2)} \tilde{w}_1(x_{(i)}, x^0) = -a_i(x)|_{x_i=x_i^0}$ и значит

$$D_{x_{(i)}}^{(2)} \tilde{w}_1(x_{(i)}, x^0) = -a_i(x)|_{x_i=x_i^0} \tilde{w}_0(x_{(i)}, x^0).$$

Отсюда, используя (19) и (20), нетрудно получить

$$D_{x_{(i)}}^{(2)} \tilde{w}_n(x_{(i)}, x^0) = -a_i(x)|_{x_i=x_i^0} \tilde{w}_{n-1}(x_{(i)}, x^0). \quad (21)$$

Переходя к пределу при $n \rightarrow \infty$ и учитывая, что $\lim_{n \rightarrow \infty} \tilde{w}_n(x_{(i)}, x^0) = w_i(x_{(i)})$, убеждаемся в справедливости (16).

Выпишем рекуррентное дифференциальное соотношение для функций $U_n(x, x^0)$. Подсчет показывает, что если i, j, k – не равные между собой числа, принимающие значения 1, 2, 3

$$\begin{aligned} D_x^{(3)} U_n(x, x^0) = & \\ = - \sum_{i=1}^3 & \left[\left(\int_{x_k^0}^{x_k} a_j(\xi) \Big|_{\xi_j=x_j^0} d\xi_k + \int_{x_j^0}^{x_j} a_k(\xi) \Big|_{\xi_k=x_k^0} d\xi_j + \int_{x_{(i)}^0}^{x_{(i)}} c(\xi) \cdot d\xi_{(i)} \right) D_{x_{(i)}}^{(2)} U_{n-1}(x, \xi) \Big|_{\xi_i=x_i} + \right. \\ & \left. + \int_{x_{(i)}^0}^{x_{(i)}} a_i(\xi) D_x^{(3)} U_{n-1}(x, \xi) \Big|_{\xi_i=x_i} d\xi_{(i)} \right] - \int_{x^0}^x c(\xi) D_x^{(3)} U_{n-1}(x, \xi) d\xi - c(x) U_{n-1}(x, x^0) \end{aligned} \quad (22)$$

Очевидно, что $U_n(x, x) = 0$, если $n \geq 1$. Положим $n = 1$ в (22). Тогда, так как $U_0(x, x^0) = 1$, получим

$$D_x^{(3)} U_{n+1}(x, x^0) = - \sum_{i=1}^3 a_i(x) D_{x_i} U_n(x, x^0) - c(x) U_n(x, x^0) \quad (23)$$

при $n = 0$. Далее из (21) следует, что при $\xi_i = x_i$

$$D_{x_{(i)}}^{(2)} U_n(x, \xi) = -a_i(x) U_{n-1}(x, \xi). \quad (24)$$

Предположим, что формула (23) верна при $n = m - 1$. Докажем ее справедливость и при $n = m$. Для этого, подставим значения из (23) и (24), взятые при $n = m$, в формулу (22), в которой $n = m + 1$. Получим

$$\begin{aligned} D_x^{(3)} U_{m+1}(x, x^0) = & \sum_{i=1}^3 \left[a_i(x) \left(\int_{x_k^0}^{x_k} a_j(\xi) \Big|_{\xi_j=x_j^0} d\xi_k + \int_{x_j^0}^{x_j} a_k(\xi) \Big|_{\xi_k=x_k^0} d\xi_j + \int_{x_{(i)}^0}^{x_{(i)}} c(\xi) \cdot d\xi_{(i)} \right) U_{m-1}(x, \xi) \Big|_{\xi_i=x_i} + \right. \\ & \left. + \int_{x_{(i)}^0}^{x_{(i)}} a_i(\xi) \left(\sum_{j=1}^3 a_j(x) D_{x_j} U_{m-1}(x, \xi) + c(x) U_{m-1}(x, \xi) \right) \Big|_{\xi_i=x_i^0} d\xi_{(i)} \right] + \\ & + \sum_{i=1}^3 \int_{x^0}^x \left(a_i(x) c(\xi) D_{x_i} U_{m-1}(x, \xi) + c(x) c(\xi) U_{m-1}(x, \xi) \right) d\xi. \end{aligned} \quad (25)$$

Обозначим коэффициент при $a_i(x)$ через $b_i(x)$. Применяя равенство (18), получим

$$b_i(x) = \left(\int_{x_k^0}^{x_k} a_j(\xi) \cdot \Big|_{\xi_j=x_j} d\xi_k + \int_{x_j^0}^{x_j} a_k(\xi) \cdot \Big|_{\xi_k=x_k^0} d\xi_j + \int_{x_0^0}^{x_0^{(i)}} c(\xi) \cdot d\xi_{(i)} \right) U_{m-1}(x, \xi) \Big|_{\xi_i=x_i} + \\ + \sum_{j=1}^3 \int_{x_0^0}^{x_0^{(j)}} a_j(\xi) D_{x_i} U_{m-1}(x, \xi) \Big|_{\xi_j=x_j} d\xi_{(j)} + \int_{x_0^0}^x c(\xi) D_{x_i} U_{m-1}(x, \xi) = -D_{x_i} U_m(x, x^0).$$

Аналогично, обозначая коэффициент при $c(x)$ через $d(x)$ получим

$$d(x) = \sum_{i=1}^3 \int_{x_0^0}^{x_0^{(i)}} a_i(\xi) U_{m-1}(x, \xi) \Big|_{\xi_i=x_i^0} d\xi_{(i)} + \int_{x_0^0}^x c(\xi) U_{m-1}(x, \xi) d\xi = -U_m(x, x^0).$$

Подставляя полученные значения коэффициентов $b_i(x)$ и $d(x)$ в формулу (25) получим (23) при $n = m$. Значит, формула (24) верна для любого $n \in \mathbb{N}$. Для окончательного доказательства теоремы перейдем в формуле (23) к пределу при $n \rightarrow \infty$. Тогда будем иметь $\mathcal{L}(D)U(x) = 0$. Теорема доказана.

Замечание 2. Если коэффициенты имеют гладкость $c, a_i \in C^1(\overline{D})$, $\partial^2 a_i / \partial x_i^2 \in C(\overline{D})$, тогда $R_{x_i x_j}(x^0, x) \in C(\overline{D})$.

2. Задача Коши

Исследуем задачу Коши. Рассмотрим следующие тождества для функций $u, v \in C^3(G)$

$$v\mathcal{L}(D)u + u\mathcal{L}^*(D)v = \\ = (u_{x_2 x_3} v + a_1 uv)_{x_1} + (-u_{x_3} v_{x_1} + a_2 uv)_{x_2} + (uv_{x_1 x_2} + a_3 uv)_{x_3}, \\ = (uv_{x_2 x_3} + a_1 uv)_{x_1} + (u_{x_1 x_3} v + a_2 uv)_{x_2} + (-u_{x_1} v_{x_2} + a_3 uv)_{x_3}, \\ = (-u_{x_2} v_{x_3} + a_1 uv)_{x_1} + (uv_{x_1 x_3} + a_2 uv)_{x_2} + (u_{x_1 x_2} v + a_3 uv)_{x_3}.$$

Складывая их, найдем

$$3(v\mathcal{L}(D)u + u\mathcal{L}^*(D)v) = (u_{x_2 x_3} v - u_{x_2} v_{x_3} + uv_{x_2 x_3} + 3a_1 uv)_{x_1} + \\ + (u_{x_1 x_3} v - u_{x_3} v_{x_1} + uv_{x_1 x_3} + 3a_2 uv)_{x_2} + (u_{x_1 x_2} v - u_{x_1} v_{x_2} + uv_{x_1 x_2} + 3a_3 uv)_{x_3}. \tag{26}$$

Из обозначений, сделанных в начале статьи, следует, что область G определяется точкой x^0 , если поверхность $\sigma(x) = 0$ фиксирована. Поэтому $G = G(x^0)$. Вернемся к предыдущему тождеству (26) и заменим в нем x на ξ , вместо $v(\xi)$ подставим $R(\xi, x)$ и проинтегрируем по $G(x)$. Обозначим интегралы от каждой скобки через J_1, J_2 и J_3 соответственно. Компоненты вектора внешней нормали к поверхности $\sigma(x) = 0$ обозначим n_{ξ_i} , $i = 1, 2, 3$. Вычислим J_1 . Имеем

$$J_1 = \int_{G(x)} \left[u_{\xi_2 \xi_3} R - 1/2 (u_{\xi_2} R_{\xi_3} + u_{\xi_3} R_{\xi_2}) + u R_{\xi_2 \xi_3} + 3a_1 u R \right]_{\xi_1} d\xi = \\ = \int_{\sigma \cup S} \left[u_{\xi_2 \xi_3} R - 1/2 (u_{\xi_2} R_{\xi_3} + u_{\xi_3} R_{\xi_2}) + u R_{\xi_2 \xi_3} + 3a_1 u R \right] n_{\xi_1} d\sigma.$$

Используя свойства функции Римана (6), найдем

$$J_1 = \int_{\sigma(x)} \left[u_{\xi_2 \xi_3} R - 1/2 (u_{\xi_2} R_{\xi_3} + u_{\xi_3} R_{\xi_2}) + u R_{\xi_2 \xi_3} + 3a_1 u R \right] n_{\xi_1} d\sigma - \\ - \int_{S_1(x)} \left\{ (u R)_{\xi_2 \xi_3} - 3/2 \left[(u R_{\xi_2})_{\xi_3} + (u R_{\xi_3})_{\xi_2} \right] + 3 \left(R_{\xi_2 \xi_3} + a_1 R \right) u \right\} ds.$$

Здесь $\sigma(x)$ – часть поверхности $\sigma(x) = 0$, находящаяся в области $\overline{G}(x)$. Обозначим $P_i(x) = \tau_j(x) \cap \tau_k(x)$. Интеграл по $S_1(x)$ обозначим через l_1 и вычислим его. Опять используя свойство функции Римана (6), найдем

$$l_1 = \frac{1}{2} \int_{S_1(x)} \left\{ \left[(u R)_{\xi_2} - 3(u R_{\xi_2}) \right]_{\xi_3} + \left[(u R)_{\xi_3} - 3(u R_{\xi_3}) \right]_{\xi_2} \right\} ds =$$

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{2} \int_{\tau_1(x)} \left\{ \left[(uR)_{\xi_2} - 3(uR_{\xi_2}) \right] n'_{\xi_3} + \left[(uR)_{\xi_3} - 3(uR_{\xi_3}) \right] n'_{\xi_2} \right\} ds - \\
 &\quad - \frac{1}{2} \int_{x_2}^{P_2(x)} (uR)_{\xi_2} d\xi_2 - \frac{1}{2} \int_{x_3}^{P_3(x)} (uR)_{\xi_3} d\xi_3 = \\
 &= \frac{1}{2} \int_{\tau_1(x)} \left\{ \left[(uR)_{\xi_2} - 3(uR_{\xi_2}) \right] n'_{\xi_3} + \left[(uR)_{\xi_3} - 3(uR_{\xi_3}) \right] n'_{\xi_2} \right\} ds - \\
 &\quad - 1/2u(P_2)R(P_2, x) - 1/2u(P_3)R(P_3, x) + u(x),
 \end{aligned}$$

где n'_{ξ_i} – компоненты вектора внешней нормали к кривой $\tau_1(x)$ в плоскости $\xi_1 = x_1$. Итак, J_1 имеет следующее значение

$$\begin{aligned}
 J_1 = & \int_{\sigma(x)} \left[u_{\xi_2 \xi_3} R - 1/2(u_{\xi_2} R_{\xi_3} + u_{\xi_3} R_{\xi_2}) + u R_{\xi_2 \xi_3} + 3a_1 u R \right] n_{\xi_1} d\sigma - \\
 & - \frac{1}{2} \int_{\tau_1(x)} \left\{ \left[(uR)_{\xi_2} - 3(uR_{\xi_2}) \right] n'_{\xi_3} + \left[(uR)_{\xi_3} - 3(uR_{\xi_3}) \right] n'_{\xi_2} \right\} ds + \\
 & + 1/2u(P_2)R(P_2, x) + 1/2u(P_3)R(P_3, x) - u(x).
 \end{aligned}$$

Аналогично вычисляются интегралы J_2 и J_3 . Складывая значения J_1 , J_2 и J_3 , получим

$$\begin{aligned}
 u(x) = & \frac{1}{3}u(P_1)R(P_1, x) + \frac{1}{3}u(P_2)R(P_2, x) + \frac{1}{3}u(P_3)R(P_3, x) - \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \int_{\tau_i(x)} \left[(u_{\xi_j} R - 2u R_{\xi_j}) n'_{\xi_k} + (u_{\xi_k} R - 2u R_{\xi_k}) n'_{\xi_j} \right] d\tau_i + \\
 & + \int_{\sigma(x)} \sum_{i=1}^3 \left[u_{\xi_j \xi_k} R - \frac{1}{2}(u_{\xi_j} R_{\xi_k} + u_{\xi_k} R_{\xi_j}) + u R_{\xi_j \xi_k} + 3a_i u R \right] n_{\xi_i} d\sigma - \int_{G(x)} R(\xi, x) f(\xi) d\xi. \quad (27)
 \end{aligned}$$

Для того, чтобы полученная формула давала решение задачи Коши, необходимо выразить значения u_{x_k} , $u_{x_k x_i}$ на $\sigma(x) = 0$ через данные Коши. Покажем, что это возможно, когда направление $l(x)$ не касается поверхности $\sigma(x) = 0$ ни в одной точке. В случае, когда уравнение имеет второй порядок, это известно [5].

Пусть поверхность $\sigma(x) = 0$ на некоторой своей части задается уравнением $x_1 = \sigma(x_2, x_3)$ и $\sigma \in C^4$. Можно считать, что $\varphi_k = \varphi_k(x_2, x_3)$. Легко показать, что на поверхности $\sigma(x) = 0$ верны равенства

$$\frac{\partial u}{\partial x_1} \sigma_2 + \frac{\partial u}{\partial x_2} = \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_2}, \quad \frac{\partial u}{\partial x_1} \sigma_3 + \frac{\partial u}{\partial x_3} = \frac{\partial \varphi_0}{\partial x_3}, \quad l_1 \frac{\partial u}{\partial x_1} + l_2 \frac{\partial u}{\partial x_2} + l_3 \frac{\partial u}{\partial x_3} = \varphi_1, \quad (28)$$

в которых $\sigma_i = \partial \sigma / \partial x_i$. Полученная система уравнений для определения $\partial u / \partial x_{i\sigma}$ разрешима при любой правой части, если $\Delta \equiv (l, n) \neq 0$ в произвольной точке поверхности $\sigma(x) = 0$. Далее из (28)

нетрудно получить систему уравнений для определения $\partial^2 u / \partial x_i \partial x_{j\sigma}$. Если неизвестные записать в виде вектора $X = (u_{x_1 x_1}, u_{x_1 x_2}, u_{x_1 x_3}, u_{x_2 x_2}, u_{x_2 x_3}, u_{x_3 x_3})_{|\sigma}$, то матрица этой системы

$$AX = b, \quad (29)$$

будет иметь вид

$$A = \begin{pmatrix} \sigma_2 \sigma_3 & \sigma_3 & \sigma_2 & 0 & 1 & 0 \\ \sigma_2^2 & 2\sigma_2 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ \sigma_3^2 & 0 & 2\sigma_3 & 0 & 0 & 1 \\ l_1 \sigma_2 & l_1 + l_2 \sigma_2 & l_3 \sigma_2 & l_2 & l_3 & 0 \\ l_1 \sigma_3 & l_2 \sigma_3 & l_1 + l_3 \sigma_3 & 0 & l_2 & l_3 \\ l_1^2 & 2l_1 l_2 & 2l_1 l_3 & l_2^2 & 2l_2 l_3 & l_3^2 \end{pmatrix},$$

а вектор правой части записывается в форме

$$b = \left(\frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial x_2 \partial x_3} - u_{x_1|\sigma} \sigma_{23}, \frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial x_2^2} - u_{x_1|\sigma} \sigma_{22}, \frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial x_3^2} - u_{x_1|\sigma} \sigma_{33}, \right. \\ \left. \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_2} - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial l_i}{\partial x_2} \frac{\partial u}{\partial x_{i|\sigma}}, \frac{\partial \varphi_1}{\partial x_3} - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial l_i}{\partial x_3} \frac{\partial u}{\partial x_{i|\sigma}}, \varphi_2 - \sum_{i,j=1}^3 l_i \frac{\partial l_j}{\partial x_i} \frac{\partial u}{\partial x_{j|\sigma}} \right).$$

После элементарных преобразований определитель матрицы A примет вид $\det A = \Delta^4$.
Сформулируем основной результат для задачи Коши.

Теорема 3. Задача Коши (1)–(2) имеет единственное решение, если $c, a_i \in C^1(\bar{G})$, $\partial^2 a_i / \partial x_i^2 \in C(\bar{G})$, $\varphi_k \in C^{4-k}(\sigma)$ и векторное поле $l(x)$ не касается поверхности $\sigma \in C^4$ ни в одной точке. Это решение можно найти по формуле (27), если $\partial u / \partial x_{i|\sigma}$ определить из системы (28), а $\partial^2 u / \partial x_i \partial x_{j|\sigma}$ из системы (29).

Доказательство. Единственность решения задачи (1)–(2) следует из представления (27). Для доказательства существования решения сделаем в уравнении (1) замену переменных

$$v = u - u_{|\sigma} - (x_1 - \sigma) u_{x_1|\sigma} - (x_1 - \sigma)^2 u_{x_1 x_1|\sigma},$$

где $u_{x_1|\sigma}$ и $u_{x_1 x_1|\sigma}$ находятся через φ_i из (28) и (29). Тогда, уравнение (1) примет вид $\mathcal{L}(D)v = f_1$, а условия (2) станут однородными. В силу замечаний к теоремам 1 и 2 имеем $u_{x_i x_i} \in C(\bar{G})$. Ясно, что $f_1 \in C(\bar{G}(x^0))$. Если теперь показать, что функция

$$v(x) = - \int_{G(x)} R(\xi, x) f_1(\xi) d\xi$$

является решением однородной задачи (1)–(2), то теорема будет доказана.

Нетрудно подсчитать, что

$$\frac{\partial v}{\partial x_i} = \int_{S_i(x)} R(\xi, x) f_1(\xi) \Big|_{\xi_i=x_i} d\xi_{(i)} - \int_{G(x)} \frac{\partial R}{\partial x_i}(\xi, x) f_1(\xi) d\xi, \\ \frac{\partial^2 v}{\partial x_i \partial x_k} = - \int_{x_j}^{P_j(x)} R(\xi, x) f_1(\xi) \Big|_{\xi_i=x_i}^{\xi_k=x_k} d\xi_j + \int_{S_i(x)} \frac{\partial R}{\partial x_k}(\xi, x) f_1(\xi) \Big|_{\xi_i=x_i} d\xi_{(i)} + \\ + \int_{S_k(x)} \frac{\partial R}{\partial x_i}(\xi, x) f_1(\xi) \Big|_{\xi_k=x_k} d\xi_{(k)} - \int_{G(x)} \frac{\partial^2 R}{\partial x_i \partial x_k}(\xi, x) f_1(\xi) d\xi, \\ \frac{\partial^3 v}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k} = R(x, x) f_1(x) - \sum_{i=1}^3 \int_{x_i}^{P_i(x)} \frac{\partial R}{\partial x_i}(\xi, x) f_1(\xi) \Big|_{\xi_k=x_k}^{\xi_j=x_j} d\xi_i + \\ + \sum_{i=1}^3 \int_{S_i(x)} \frac{\partial^2 R}{\partial x_i \partial x_k}(\xi, x) f_1(\xi) \Big|_{\xi_i=x_i} d\xi_{(i)} - \int_{G(x)} \frac{\partial^3 R}{\partial x_i \partial x_j \partial x_k}(\xi, x) f_1(\xi) d\xi,$$

а поэтому

$$\mathcal{L}(D)v = f_1(x) - \sum_{i=1}^3 \int_{x_i}^{P_i(x)} \frac{\partial R}{\partial x_i}(\xi, x) f_1(\xi) \Big|_{\xi_k=x_k}^{\xi_j=x_j} d\xi_i + \\ + \sum_{i=1}^3 \int_{S_i(x)} \left(\frac{\partial^2 R}{\partial x_k \partial x_j}(\xi, x) + a_i(x) R(\xi, x) \right) f_1(\xi) \Big|_{\xi_i=x_i} d\xi_{(i)} - \int_{G(x)} \mathcal{L}_x(D) R(\xi, x) f_1(\xi) d\xi.$$

В силу свойств функции Римана $\mathcal{L}(D)v = f_1$. Легко видеть, что $v_{|\sigma} = v_{x_i|\sigma} = v_{x_i x_k|\sigma} = 0$ для любых, значений $i, k = 1, 2, 3$, не обязательно различных. Теорема доказана.

3. Задача Гурса

Для исследования существования и единственности решения задачи Гурса необходимы следующие рассуждения. Пусть $u(x)$ и $v(x)$ обладают гладкостью, требуемой от решения задачи Гурса, и кроме того $D_x^{(3)}u, D_x^{(3)}v \in C(\bar{D})$. Нетрудно убедиться, что

$$D_x^{(3)}(uv) = vD_x^{(3)}u + uD_x^{(3)}v + \sum_{i=1}^3 \left(v_{x_i} D_{x(i)}^{(2)}u + u_{x_i} D_{x(i)}^{(2)}v \right). \quad (30)$$

Если теперь к обеим частям полученного тождества добавить следующее равенство

$$v\mathcal{L}(D)u + u\mathcal{L}^*(D)v = vD_x^{(3)}u + uD_x^{(3)}v + \sum_{i=1}^3 (a_i uv)_{x_i},$$

справедливое в \overline{D} , то будем иметь

$$D_x^{(3)}(uv) + \sum_{i=1}^3 (a_i uv)_{x_i} = v\mathcal{L}(D)u + u\mathcal{L}^*(D)v + \sum_{i=1}^3 \left(v_{x_i} D_{x(i)}^{(2)}u + u_{x_i} D_{x(i)}^{(2)}v \right). \quad (31)$$

Рассмотрим аналог тождества (30)

$$D_{x(i)}^{(2)}(uv) = vD_{x(i)}^{(2)}u + uD_{x(i)}^{(2)}v + u_{x_k} v_{x_j} + u_{x_j} v_{x_k}.$$

Положим в нем $v = v_{x_i}$ и просуммируем по i . Будем иметь

$$\sum_{i=1}^3 D_{x(i)}^{(2)}(uv_{x_i}) = \sum_{i=1}^3 v_{x_i} D_{x(i)}^{(2)}u + 3uD_x^{(3)}v + 2\sum_{i=1}^3 u_{x_i} D_{x(i)}^{(2)}v.$$

Вычтем полученное тождество из равенства (31). Тогда, после некоторых простых преобразований, получим следующее тождество в \overline{D}

$$D_x^{(3)}(uv) - \sum_{i=1}^3 D_{x(i)}^{(2)}(uv_{x_i}) = v\mathcal{L}(D)u + u\mathcal{L}^*(D)v - \sum_{i=1}^3 \left[u \left(D_{x(i)}^{(2)}v + a_i v \right) \right]_{x_i}. \quad (32)$$

Выберем вместо $v(x)$ функцию Римана уравнения (1), т.е. положим $v(x) = R(x, x^1)$. Это возможно в силу теоремы 1 и включения $D_x^{(3)}v \in C(\overline{D})$. Тогда $\mathcal{L}^*(D)v = 0$. Затем положим $x = \xi$ и проинтегрируем последовательно по ξ_i ($i = 1, 2, 3$) в пределах от x_i^0 до x_i . Получим

$$\begin{aligned} & u(x)R(x, x) - u(x^0)R(x^0, x) - \sum_{i=1}^3 \left(u(x)R(x_{|x_i=x_i^0}, x) - u(x^0)R(x_{|x_i^0=x_i}, x) \right) - \\ & - \sum_{i=1}^3 \int_{x_i^0}^{x_i} \left[u(x)R_{\xi_i}(x_{|x_i=\xi_i}, x) - \sum_{i=1, j \neq i}^3 u(x)R_{\xi_i}(x_{|x_j=x_j^0}, x) + u(x^0)R_{\xi_i}(x_{|x_i^0=\xi_i}, x) \right] d\xi_i = \\ & = \int_{x^0}^x R(\xi, x) \mathcal{L}_{\xi}(D)u(\xi) d\xi - \sum_{i=1}^3 \int_{x_i^0}^{x(i)} \left(u(\xi) \left(D_{\xi(i)}^{(2)}R(\xi, x) + a_i(\xi)R(\xi, x) \right) \right)_{|_{\xi_i=x_i^0}} d\xi_{(i)}. \end{aligned} \quad (33)$$

Предположим, что

$$\begin{aligned} \varphi_i(x_{(i)})_{|x_j=x_j^0} &= \varphi_j(x_{(j)})_{|x_i=x_i^0} = \psi_k(x_k); \\ \psi_i(0) &= \psi_j(0) = \psi_k(0) = \psi_0, \end{aligned} \quad (34)$$

где i, j, k – различные числа, принимающие значения 1, 2, 3. Учитывая, что функция $R(x, x^1)$ является решением задачи (5)–(6), получим

$$\begin{aligned} u(x) &= \sum_{i=1}^3 \left(\varphi_i(x_{(i)})R(x_{|x_i=x_i^0}, x) - \psi_i(x_i)R(x_{|x_i^0=x_i}, x) \right) + \psi_0 R(x^0, x) - \\ & - \sum_{i=1}^3 \int_{x_i^0}^{x_i} \left(\psi_i(\xi_i)R_{\xi_i}(x_{|x_i^0=\xi_i}, x) - \sum_{j=1, j \neq i}^3 \varphi_j(x_{(j)})R_{\xi_i}(x_{|x_j=x_j^0}, x) \right) d\xi_i + \\ & + \sum_{i=1}^3 \int_{x_i^0}^{x(i)} \varphi_i(\xi_{(i)}) \left(D_{\xi(i)}^{(2)}R(\xi, x) + a_i(\xi)R(\xi, x) \right)_{|_{\xi_i=x_i^0}} d\xi_{(i)} + \int_{x^0}^x f(\xi)R(\xi, x) d\xi. \end{aligned} \quad (35)$$

Итак, сформулируем основной результат для задачи Гурса.

Теорема 4. Пусть $f, c, a_i, \partial a_i / \partial x_i \in C(\overline{D})$, $(i = \overline{1, 3})$, а функции $\varphi_i(x_{(i)})$, удовлетворяющие условиям согласования (34), имеют гладкость $D_{x_{(i)}}^{(2)} \varphi_i \in C(\overline{D})$, тогда регулярное решение задачи Гурса существует, единственно и записывается в виде (35).

Доказательство. Очевидно, что $D_x^{(3)} u \in C(\overline{D})$, а поэтому единственность решения задачи Гурса в требуемом классе функций следует из представления (35). Докажем существование. Нетрудно видеть, что правая часть формулы (35) обладает гладкостью, необходимой для искомого решения. Проверим, что $u(x)$, найденная из (35), удовлетворяет уравнению (1) и краевым условиям (3). Начнем с последнего. Если воспользоваться свойствами функции Римана (5)–(6) и условиями согласования (34), то нетрудно убедиться, что интегральные члены в формуле (35) при $x_i = x_i^0$ обращаются в нуль, а сумма членов, не содержащих интегралов, будет равна $\varphi_i(x_{(i)})$. Значит, условия (3) выполнены. Обозначим

$$u_0(x) = \int_{x^0}^x f(\xi) R(\xi, x) d\xi. \tag{36}$$

Покажем, что $\mathcal{L}(D)u_0(x) = f(x)$. Действительно,

$$D_x^{(3)} u_0(x) = f(x) + \sum_{i=1}^3 \int_{x_i^0}^{x_{(i)}} f(\xi) D_{x_{(i)}}^{(2)} R(\xi, x) |_{\xi=x_i} d\xi_{(i)} + \int_{x^0}^x f(\xi) D_x^{(3)} R(\xi, x) d\xi,$$

и

$$D_{x_i} u_0(x) = \int_{x_i^0}^{x_{(i)}} f(\xi) R(\xi, x) |_{\xi=x_i} d\xi_{(i)} + \int_{x^0}^x f(\xi) D_{x_i} R(\xi, x) d\xi,$$

и значит, используя свойство функции Римана (16), получим

$$\mathcal{L}(D)u_0(x) = f(x) + \int_{x^0}^x f(\xi) \mathcal{L}_x(D) R(\xi, x) d\xi.$$

Опять вспоминая теорему 2, убеждаемся в верности доказываемого равенства.

Обозначим $u_1(x) = u(x) - u_0(x)$. Покажем, что $\mathcal{L}(D)u_1(x) = 0$. Очевидно, для $u_1(x)$ верна формула (35), записанная при $f(x) = 0$. Если подставим в эту формулу выражения

$$\varphi_i(x_{(i)}) = u(x) |_{x_i=x_i^0}, \quad \psi_i(x_i) = u(x) \Big|_{\substack{x_k=x_k^0 \\ x_j=x_j^0}}$$

где числа i, j, k не равны между собой и принимают значения 1, 2, 3, то в силу выполнимости условий (3) получим формулу (33) без слагаемого

$$\int_{x^0}^x f(\xi) \mathcal{L}_\xi(D)u(\xi) d\xi.$$

Далее, проводя рассуждения, обратные сделанным при выводе формулы (33), найдем

$$\int_{x^0}^x \left(D_\xi^{(3)} (u_1(x) R(\xi, x)) - \sum_{i=1}^3 D_{\xi_{(i)}}^{(2)} (u_1(x) R_{\xi_i}(\xi, x)) + \sum_{i=1}^3 u_1(x) \left(D_{\xi_{(i)}}^{(2)} R(\xi, x) + a_i(\xi) R(\xi, x) \right)' \Big|_{\xi_i} \right) d\xi = 0.$$

Положим $x = x^1$, $x^0 = x$, $R(x, x^1) = v(x)$ и применим к обеим частям полученного равенства оператор $D_x^{(3)}$. Будем иметь

$$D_x^{(3)} (u_1 v) - \sum_{i=1}^3 D_{x_{(i)}}^{(2)} (u_1 v_{x_i}) + \sum_{i=1}^3 \left(u_1 \left(D_{x_{(i)}}^{(2)} v + a_i(x) v \right) \right)' \Big|_{x_i} = 0.$$

Вспоминая тождество (32) и рассматривая его при $v(x) = R(x, x^1)$, получим $v \mathcal{L}(D)u_1 = 0$. Так как $v(x) \neq 0$, то $\mathcal{L}(D)u_1 = 0$. Теорема полностью доказана.

Замечание 3. Функция $u_0(x)$ из равенства (36) является решением неоднородной задачи Гурса с однородными краевыми условиями.

Пример. Исследуем задачу Гурса при $a_i(x) = 0$ для $i = 1, 2, 3$ и $c(x) = \lambda$

$$D_x^{(3)} u + \lambda u = f(x), \quad u(x) |_{S_i(x^0)} = \varphi_i(x_{(i)}), \quad i = 1, 2, 3.$$

Функция Римана этого уравнения легко находится из формулы (7). Она имеет вид

$$R_\lambda(x, \xi) = \sum_{n=0}^{\infty} (-\lambda)^n (x_1 - \xi_1)^{n,!} (x_2 - \xi_2)^{n,!} (x_3 - \xi_3)^{n,!}.$$

Решение задачи Гурса (35), которое с помощью метода нормированных систем функций [6] и операторов $U(D)$ и $V(D)$ из [6, теорема 4.13] можно также записать как решение задачи C_β при $\beta = (1,1,1)$, легко преобразуется к виду

$$u(x) = \sum_{i=1}^3 (\varphi_i(x_{(i)}) - \psi_i(x_i)) + \psi_0 - \lambda \int_{x_0}^x \left(\sum_{i=1}^3 (\varphi_i(\tau_{(i)}) - \psi_i(\tau_i)) + \psi_0 \right) R_\lambda(\tau, x) d\tau + \int_{x_0}^x f(\tau) R_\lambda(\tau, x) d\tau,$$

где функции $\psi_i(x_i)$ необходимо брать из (34). Найденное решение совпадает с полученным другим путем в [1]. Метод нормированных систем функций [6], примененный к уравнению Лапласа позволяет строить специальные полиномы [7, 8] и решение задачи Дирихле [9], а примененный к линейным ОДУ – новое представление решений задачи Коши [10].

Литература

1. Карачик, В.В. Разработка теории нормированных систем функций и их применения к решению начально-краевых задач для уравнений в частных производных: дисс. ... д-ра физ.-мат. наук / В.В. Карачик. – Ташкент, 2001. – 213 с.
2. Мюнц, Г. Интегральные уравнения / Г. Мюнц. – М.: ГТТИ, 1934. – 330 с.
3. Жегалов, В.И. Трехмерный аналог задачи Гурса / В.И. Жегалов // Неклассические уравнения и уравнения смешанного типа. – Новосибирск: Ин-т матем. СО АН СССР, 1990. – С. 94–98.
4. Бицадзе, А.В. Уравнения математической физики / А.В. Бицадзе. – М.: Наука, 1976. – 296 с.
5. Владимиров, В.С. Уравнения математической физики / В.С. Владимиров. – М.: Наука, 1976. – 436 с.
6. Карачик, В.В. Метод нормированных систем функций / В.В. Карачик. – Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ, 2014. – 452 с.
7. Karachik, V.V. On some special polynomials / V.V. Karachik // Proceedings of the American Mathematical Society. – 2004. – Vol. 132, no. 4. – P. 1049–1058.
8. Карачик, В.В. Полиномиальные решения дифференциальных уравнений в частных производных с постоянными коэффициентами I / В.В. Карачик // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2011. – Вып. 4. – № 10(227). – С. 4–17.
9. Карачик, В.В. Полиномиальные решения задачи Дирихле для бигармонического уравнения в шаре / В.В. Карачик, Н.А. Антропова // Дифференциальные уравнения. – 2013. – Т. 49, № 2. – С. 250–254.
10. Карачик, В.В. Метод построения решений линейных обыкновенных дифференциальных уравнений с постоянными коэффициентами / В.В. Карачик // ЖВМиМФ. – 2012. – Т. 52, № 2. – С. 237–252.

Поступила в редакцию 24 декабря 2014 г.

CAUCHY AND GOURSAT PROBLEMS FOR DIFFERENTIAL EQUATION OF THIRD ORDER

V.V. Karachik¹

Cauchy and Goursat problems for the hyperbolic equation of third order are considered. The theorem of the existence of the Riemann function is proved and on the basis of the aforementioned function solutions for the Cauchy and Goursat problems are introduced.

Keywords: Cauchy and Goursat problems; hyperbolic equation of third order; Riemann function.

References

1. Karachik V.V. *Razrabotka teorii normirovannykh sistem funktsij i ih primeneniya k resheniyu nachal'no-kraevykh zadach dlya uravnenij v chastnykh proizvodnykh. Diss. dokt. fiz.-mat. nauk* (The development of the theory of normed systems of functions and their application to the solution of the initial-boundary value problems for equations with differential derivatives. Dr. phys. and math. sci. diss.). Tashkent, 2001. 213 p.
2. Munz G. *Integral'nye uravneniya* (Integral equations). Moscow, GTTI Publ., 1934. 330 p.
3. Zhegalov V.I. Trekhmerniy analog zadachi Gursa (Three-dimensional analogue of the Goursat problem). *Neklasicheskie uravneniya i uravneniya smeshannogo tipa* (Non-classical equations and the equations of mixed type). Novosibirsk, Institut matematiki SO AN SSSR Publ., 1990. pp. 94–98.
4. Bitsadze A.V. *Uravneniya matematicheskoy fiziki* (The equations of mathematical physics). Moscow, Nauka Publ., 1976. 296 p. (in Russ.).
5. Vladimirov V.S. *Uravneniya matematicheskoy fiziki* (The equations of mathematical physics). Moscow, Nauka Publ., 1981. 512 p. (in Russ.).
6. Karachik V.V. *Metod normirovannykh sistem funktsij* (Method of normed systems of functions). Chelyabinsk: Izdatel'skiy centr YuUrGU, 2014. 452 p.
7. Karachik V.V. On some special polynomials. *Proceedings of the American Mathematical Society*. 2004. Vol. 132, no. 4. pp. 1049–1058.
8. Karachik V.V. *Polinomial'nye resheniya differentsialnykh uravnenij v chastnykh proizvodnykh s postoyannymi koeffitsientami I* [Polynomial solutions to partial differential equations with constant coefficients I]. *Bulletin of South Ural State University. Series of "Mathematics. Mechanics. Physics"*. 2011. Issue 4, no. 10(227). pp. 4–17.
9. Karachik V.V., Antropova N.A. Polynomial solutions of the Dirichlet problem for the biharmonic equation in the ball. *Differential Equations*. 2013. Vol. 49, no. 2. pp. 251–256.
10. Karachik V.V. Method for constructing solutions of linear ordinary differential equations with constant coefficients. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*. 2012. Vol. 52, no. 2. pp. 219–234.

Received 24 December 2014

¹ Karachik Valeriy Valentinovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Mathematical and Functional Analysis Department, South Ural State University.
E-mail: karachik@susu.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ СЕГРЕГАЦИИ АТОМОВ ЖЕЛЕЗА НА ПОВЕРХНОСТИ (111) НИКЕЛЯ

Г.П. Вяткин¹, С.И. Морозов²

Работа посвящена компьютерному моделированию поверхности сплавов на основе Ni первопринципными методами. Получены модели поверхности сплавов Ni(111), рассчитаны их физические свойства: релаксация, поверхностная энергия, работа выхода. Исследовано влияние расположения атомов Fe на эти характеристики.

Ключевые слова: моделирование; первопринципные методы; поверхность; никель; железо; сегрегация; релаксация.

Введение

Поиск новых материалов, обладающих заданными свойствами, является одной из основных задач современной физической химии и материаловедения. При открытии перспективных направлений исследований количество научных работ, связанных с ними, как теоретических, так и экспериментальных резко возрастает. Подобное явление наблюдается в последнее десятилетие и с углеродными нанотрубками, и с нановолокнами. Активному использованию их уникальных свойств в промышленности, однако, мешает отсутствие доступной и дешевой технологии управляемого роста (синтеза) этих объектов. Для ее создания активно и продуктивно используются различные металлические катализаторы. В экспериментальной работе [1] отмечается, что как получаемое количество нанотрубок, так и характер их роста существенно зависит от используемой поверхности-катализатора Ni, Fe, Co. Для объяснения этого явления уже предложено несколько моделей (механизмов) роста углеродных нанотрубок (механизм карбидного цикла, модель «твердая фаза–жидкость–твердая фаза»). Их ключевым моментом является характер взаимодействия атомов углерода с поверхностными атомами. К сожалению, применение экспериментальных методов для изучения такого взаимодействия затруднено, но использование современных методов компьютерного моделирования из первых принципов позволяет исследовать его подробно и надежно. Согласно [2], в настоящее время число теоретических работ по изучению адсорбции атомов углерода на поверхности Ni и Fe невелико, при этом иногда они имеют противоречивый характер [3].

В настоящей работе проведены расчеты энергетики и структур моделей исследуемых поверхностных слоев сплавов $Ni_{20-x}Fe_x$, которые в дальнейшем предполагается применить для изучения механизма взаимодействия атомов углерода, водорода и фрагментов молекул метана с поверхностью этих катализаторов.

Метод

Вычисления проводились с использованием лицензионной программы *ab-initio* расчета полной энергии и молекулярной динамики VASP (Vienna *ab initio* simulation program), разработанной факультетом физики Университета Вены [4, 5].

Расчет электронной структуры атомов выполнялся в рамках теории функционала электронной плотности (DFT) с использованием базиса плоских волн и формализма PAW, потенциалов обменно-коррекционного функционала PBE (Пердью–Бурке–Эрнцерхофа). Энергия обрезания базиса плоских волн была выбрана равной 500 eV.

¹ Вяткин Герман Платонович – член-корреспондент РАН, доктор химических наук, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

² Морозов Сергей Иванович – доцент, кандидат физико-математических наук, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: morozov72@gmail.com

Для исследования в качестве модели использовалась суперячейка (рис. 1), размерами $2 \times 2 \times 5$ (5 слоев по 4 атома в слое). Атомы первого и второго слоя для корректного воспроизведения электронной структуры объема, были зафиксированы в равновесных «идеальных» позициях объемной решетки, атомы других «верхних» слоев могли релаксировать. Толщина вакуумного слоя составляла 10 Å, что исключало взаимодействие поверхностей из-за периодических граничных условий. Интегрирование в зоне Бриллюэна выполнялось по методу Монкхорста–Пака для К-сетки $9 \times 9 \times 1$.

Релаксация получаемых структур проводилась методом сопряженных градиентов до достижения критериев сходимости по полной энергии системы менее 10^{-5} эВ и до величины остаточной силы, действующей на ион, менее 10^{-3} эВ/Å. Использованные значения параметров расчетной схемы были достаточны для обеспечения надежности результатов.

Для обозначения положения атомов Fe используется нумерация атомов Ni в ячейке. Для визуализации моделей использовалась программа VESTA [6].

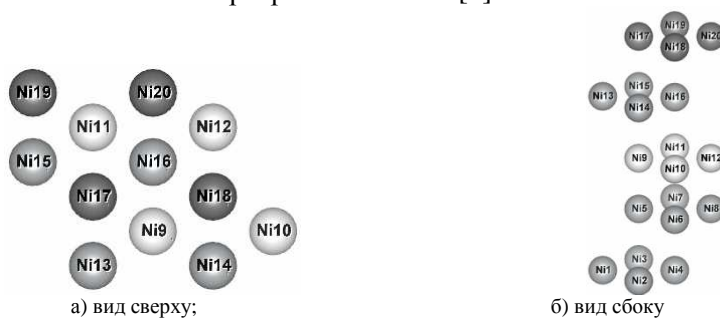


Рис. 1. Модель исследуемой поверхности Ni (111)

Результаты и их обсуждение

В качестве начальной модели для исследования была принята оптимизированная модель Ni(111), в которой последовательно один атом никеля в позициях с 9 по 20 замещался атомом железа. Полученные значения полной энергии структур и их отличие от минимально возможной энергии представлены в табл. 1.

Таблица 1
Зависимость полной энергии структур Ni₁₁Fe
от расположения атома Fe

Положение атомов Fe	Полная энергия, эВ	Приращение энергии, эВ
13	-107,35	0,00
14	-107,35	0,00
15	-107,35	0,00
16	-107,35	0,00
9	-107,27	0,08
10	-107,27	0,08
11	-107,27	0,08
12	-107,27	0,08
17	-107,16	0,19
18	-107,16	0,19
19	-107,16	0,19
20	-107,16	0,19

Наиболее энергетически выгодным является расположение атомов в четвертом слое в эквивалентных по энергиям положениях 13, 14, 15, 16. Далее менее приоритетными являются места в третьем слое (позиции 9–12). Нахождение атома замещения в пятом поверхностном слое (позиции 17–20) вызывает наибольшее увеличение энергии структуры. В качестве базовой для дальнейших исследований была выбрана структура I с минимальной энергией и с расположением атома железа в положении 13 (рис. 2, a).

Затем в структуре I последовательно замещался атом никеля атомом железа в положениях 9, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20 и выполнялся расчет полной энергии полученных структур. Результаты расчета, упорядоченные по возрастанию энергий, представлены в табл. 2.

Наименьшая энергия для изучаемой структуры была получена при нахождении атома Fe в третьем слое (положение 11), на максимально возможном удалении от атома 13. Эта модель – структура II и будет использована далее. Равновероятными (эквивалентными) в плане энергии являются позиции в третьем слое – 9, 10, 12 и в верхнем – 18. Наибольшую энергию имеет рассматриваемая структура при замещении атомов пятого слоя (позиции 17, 19, 20).

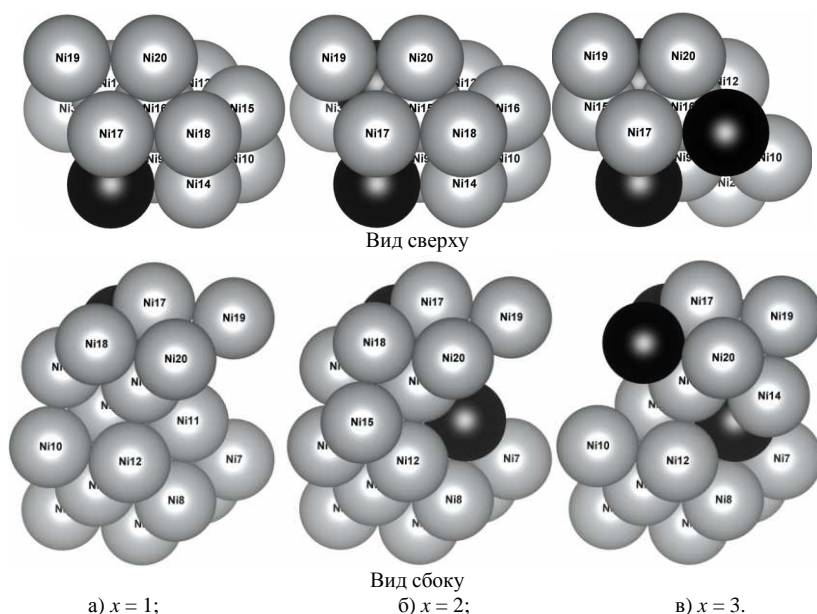


Рис. 2. Наиболее энергетически выгодные модели поверхностного слоя $Ni_{12-x}Fe_x$ атомы Ni показаны серым цветом, атомы Fe черным

Таблица 2
Зависимость полной энергии структур $Ni_{10}Fe_2$ от расположения второго атома Fe (первый атом Fe зафиксирован в положении 13)

Положение атомов Fe	Полная энергия, эВ	Приращение энергии, эВ
11	-110,48	0,00
18	-110,32	0,16
9	-110,31	0,17
10	-110,31	0,17
12	-110,31	0,17
14	-110,29	0,19
15	-110,29	0,19
16	-110,29	0,19
17	-110,14	0,34
19	-110,14	0,34
20	-110,14	0,34

Для подтверждения нахождения структуры с минимальной энергией были проведены дополнительные расчеты (табл. 3), в которых один атом железа в позиции 11 фиксировался, а второй мог занимать произвольные равновесные позиции атомов в приповерхностных слоях. Как следует из результатов, структура II (атомы Fe в положениях 11 и 13) действительно является оптимальной и в этом случае.

Таблица 3
Зависимость полной энергии структур $Ni_{10}Fe_2$
от расположения второго атома Fe
(первый атом Fe зафиксирован в положении 11)

Положение атомов Fe	Полная энергия, эВ	Приращение энергии, эВ
13	-110,48	0,00
14	-110,31	0,17
15	-110,31	0,17
16	-110,31	0,17
17	-110,21	0,27
19	-110,21	0,27
20	-110,21	0,27
18	-110,19	0,29
9	-110,11	0,37
10	-110,11	0,37
12	-110,11	0,37

Аналогичные манипуляции по размещению третьего атома Fe были произведены со структурой II. Результаты расчета полной энергии представлены в табл. 4.

Исходя из представленных расчетов, наиболее энергетически выгодной является структура III (рис. 2, в), в которой третий атом размещен в положении 18 (пятый слой), на максимально возможном в данной модели удалении от атома соседнего слоя. Наибольшей энергией структура обладает при замещении атомов никеля в третьем слое в положениях 9, 10, 12.

Таблица 4
Зависимость полной энергии структур Ni_9Fe_3
от расположения атома Fe

Положение атомов Fe	Полная энергия, эВ	Приращение энергии, эВ
18	-113,42	0,00
14	-113,30	0,12
15	-113,30	0,12
16	-113,30	0,12
17	-113,25	0,17
19	-113,25	0,17
20	-113,25	0,17
9	-113,20	0,22
10	-113,20	0,22
12	-113,20	0,22

По полученным моделям поверхностного слоя I, II и III были вычислены следующие физические характеристики (табл. 5): поверхностная энергия, работа выхода электронов, относительное изменение расстояния между слоями поверхности по отношению с расстояниями в объеме (релаксация поверхностного слоя), энергия Ферми.

Характеристики моделей поверхности

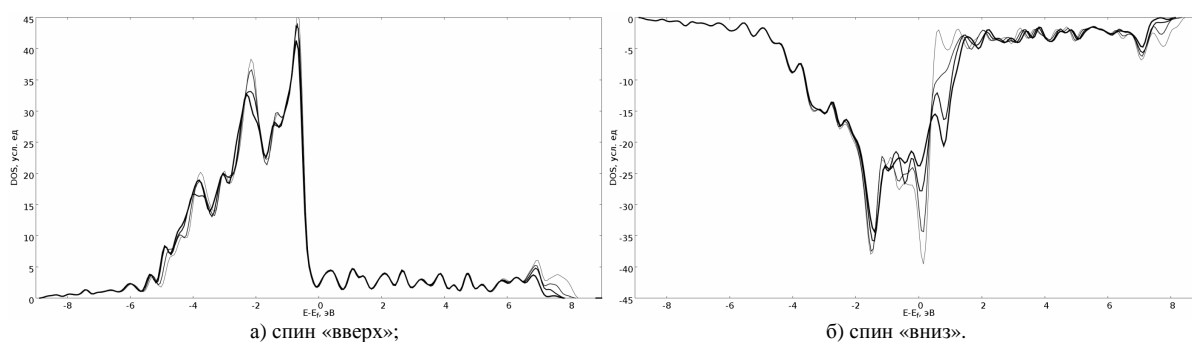
Таблица 5

Состав	Релаксация поверхностного слоя, %			Толщина слоев, Å	Поверхностная энергия, эВ	Работа выхода электрона, эВ	Энергия Ферми E_F , эВ
	δ_{23}	δ_{34}	δ_{45}				
Ni(111)	-0,32	-0,22	-1,45	8,09	0,64	4,69	3,02
$Ni_{11}Fe$	0,03	-0,73	-0,57	8,10	0,58	4,65	2,97
$Ni_{10}Fe_2$	0,24	0,14	-1,08	8,12	0,51	4,63	2,90
Ni_9Fe_3	0,08	0,86	-0,90	8,13	0,47	4,70	2,83

Замена атома никеля атомом железа приводит к изменению расстояний между слоями. Так, расстояние между вторым и третьим слоем в структурах I, II, III, больше объемного расстояния, в то время как в чистом металле оно меньше. Сжатие для всех структур наблюдается только между слоями 4 и 5. В целом, толщина приповерхностного слоя с добавлением атомов железа увеличивается с 8,09 Å до 8,13 Å.

В полученных моделях наблюдается уменьшение поверхностной энергии от 0,64 эВ (чистая поверхность Ni(111)) до 0,47 эВ (структура III). Энергия Ферми также убывает. Средний магнитный момент атомов Ni и Fe не изменяется. Работа выхода электрона сначала убывает от 4,69 эВ (чистая поверхность), достигая минимального значения 4,63 эВ (структура II), затем резко возрастает до 4,70 эВ (структура III).

Для структуры I, II и III были рассчитаны плотности электронных состояний (рис. 3). Наличие атомов железа приводит к их перераспределению. Так последовательное увеличение количества атомов Fe уменьшает плотность состояний для энергий $-1,8$; $-0,8$; и $6,9$ эВ для конфигурации «спин вверх» и $-1,4$; $0,1$; $0,8$; $7,0$ и $7,7$ эВ для конфигурации «спин вниз».



а) спин «вверх»; б) спин «вниз».
Рис. 3. Плотность электронных состояний исследуемых моделей
Толщина линии показывает количество атомов Fe:

самая тонкая линия соответствует «чистой» поверхности Ni (111), самая толстая – структуре с тремя атомами Fe

Заключение

Выполненные расчеты в рамках теории функционала электронной плотности позволили получить модели поверхностных слоев сплавов Ni (111) с различным содержанием атомов Fe, которые в дальнейшем предполагается использовать для расчета энергий и геометрических параметров при адсорбции атомов и молекул. Выявлено влияние содержания атомов Fe в исследуемых моделях на изменение физических характеристик поверхностного слоя. Их увеличение приводит к снижению поверхностной энергии, к снижению работы выхода электрона для структур I и II и ее росту для структуры III, релаксации расстояний между атомными слоями, вызывает изменение электронной структуры.

Наиболее энергетически выгодной для адсорбции частиц является структура III, содержащая три атома Fe, размещенных на максимальном удалении друг от друга в «верхних» слоях.

Благодарности

Авторы благодарят директора лаборатории суперкомпьютерного моделирования ЮУрГУ П.С. Костенецкого, директора суперкомпьютерного центра ЮУрГУ К.В. Бородулина за всестороннюю техническую поддержку при проведении исследований.

Литература

1. Исследование микроструктуры углеродного наноматериала, полученного на железоникелевом катализаторе / А.А. Новикова, Т.Ю. Киселева, Б.П. Тарасов, В.Е. Мурадян // Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. – 2004. – № 3. – С. 70–73.
2. Мутигуллин, И.В. Влияние степени покрытия углеродом на возможность формирования твердого раствора внедрения в подповерхностном слое железа (001) и (111) / И.В. Мутигуллин, Д.И. Бажанов, А.С. Илюшин // Физика твердого тела. – 2011. – Том 53. – Вып. 3. – С. 558–563.
3. Mueller, J.E. Structures, Energetics and Reaction Barriers for CH_x Bound to the Nickel (111) Surface / J.E. Mueller, A.C.T. van Duin, W.A. Goddard, III // J. Phys. Chem. C. – 2009. – Vol. 113, № 47. – P. 20290–20306.

4. Kresse, G. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // *Phys. Rev. B.* – 1996. – Vol. 54. – Issue 16. – P. 11169.

5. Kresse, G. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method / G. Kresse, D. Joubert // *Phys. Rev. B* – 1999. – Vol. 59. – Issue 3. – P. 1758.

6. Momma K. VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data / K. Momma, F. Izumi // *Journal of Applied Crystallography.* – 2011. – Vol. 44. – Issue 6. – P. 1272–1276.

Поступила в редакцию 11 марта 2015 г.

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2015, vol. 7, no. 2, pp. 44–49

AB INITIO MODELING OF SEGREGATION OF IRON ATOMS ON THE (111) NICKEL SURFACE

G.P. Viatkin¹, S.I. Morozov²

The paper is devoted to computer modeling of surface alloys Ni-based ab initio methods. Obtained surface model alloys Ni (111), calculated their physical properties: relaxation, surface energy, work function. Effect of location of the Fe atoms on these characteristics is studied.

Keywords: computer modeling; ab initio methods; surface; nickel; iron; segregation; relaxation.

References

1. Novikova A.A., Kiseleva T.Yu., Tarasov B.P., Muradyan V.E. Issledovanie mikrostruktury uglerodnogo nanomateriala, poluchennogo na zhelezo-nikelevom katalizatore (A Study of Carbon Nanomaterial Microstructure, Produced on Iron-Nickel Catalyst). *Poverkhnost'. Rentgenovskie, sinkhrotronnye i neytronnye issledovaniya.* (A Study of Carbon Nanomaterial Microstructure, Produced on Iron-Nickel Catalyst). 2004. no. 3. pp. 70–73. (in Russ.).

2. Mutigullin I.V., Bazhanov D.I., Ilyushin A.S. Effect of coverage by carbon on the possibility of forming an interstitial solid solution in Fe(001) and Fe(111) subsurface layers. *Physics of the Solid State.* 2011. Vol. 53, no. 3. pp. 599–605.

3. Mueller J.E., van Duin A.C.T., Goddard W.A., III Structures, Energetics and Reaction Barriers for CH_x Bound to the Nickel (111) Surface. *J. Phys. Chem. C.* 2009. Vol. 113, no. 47. pp. 20290–20306. DOI: 10.1021/jp810555y.

4. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B.* 1996. Vol. 54. Issue 16. p. 11169. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>.

5. Kresse G., Joubert D. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method. *Phys. Rev. B.* 1999. Vol. 59. Issue 3. p. 1758. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.59.1758>.

6. Momma K., Izumi F. VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data. *Journal of Applied Crystallography.* 2011. Vol. 44. Issue 6. pp. 1272–1276. DOI: 10.1107/S0021889811038970.

Received 11 March 2015

¹ Viatkin German Platonovich is a Corresponding Member of Russian Academy Science, Dr. Sc. (Chemistry), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

² Morozov Sergey Ivanovich is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

E-mail: morozov72@gmail.com

ВЛИЯНИЕ ВНЕШНЕГО ВОЗДЕЙСТВИЯ НА РАЗВИТИЕ ВОЗМУЩЕНИЙ В ОРЕГОНАТОРЕ С ДИФФУЗИЕЙ

Л.А. Прокудина¹

Представлена модель Филда–Нойеса–Кёрса реакции Белоусова–Жаботинского, называемая орегонатором, с учетом диффузии компонентов и внешнего воздействия. Найдены стационарные решения системы. Представлены результаты вычислительных экспериментов по неустойчивости системы с учетом диффузии и внешнего воздействия, выделены два типа неустойчивых режимов.

Ключевые слова: орегонатор; неустойчивость; возмущения; диффузия; колебательные режимы; внешнее воздействие.

С середины 60-х годов XX века и по настоящее время большое значение придается управлению режимом колебаний в химически реагирующих системах с помощью внешнего воздействия на исследуемую систему [1]. В работе исследуется облучение раствора (реакция Белоусова–Жаботинского) ультрафиолетовым излучением. С помощью УФ-излучения можно деформировать области существования колебаний и получать колебательные режимы при тех условиях, где их нет в отсутствие облучения. В экспериментах [1] были получены сложные режимы колебаний, которые наблюдаются в очень узких интервалах изменения параметров, и получить их с помощью подбора реагентов не удастся. Также примеры теоретического и экспериментального изучения внешнего воздействия можно найти на биохимические, биологические процессы, описываемые уравнениями «реакция–диффузия» [2]. К числу актуальных проблем в биологии относятся динамика распространения числа пораженных клеток в живом организме, в том числе мутированных клеток при лейкемии, цитокининов при атеросклерозе [3, 4]. Ультрафиолетовое излучение – результат остановки клеточного цикла [5].

В данной работе представлены результаты математического моделирования в орегонаторе с учетом диффузии компонентов при внешнем воздействии. Показана возможность получения новых стационарных состояний, колебательного режима для автокаталитической реакции с диффузией. К математическим моделям химически-реагирующих систем как математически подобным обращаются в своей работе биологи, экологи.

Математическая модель орегонатора с учетом диффузии компонентов [6] и внешнего воздействия (параметр P) имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial X}{\partial t} &= k_1 AY - k_2 XY + k_3 BX - 2k_4 X^2 + D_X \frac{\partial^2 X}{\partial \xi^2}, \\ \frac{\partial Y}{\partial t} &= -k_1 AY - k_2 XY + f k_5 Z + D_Y \frac{\partial^2 Y}{\partial \xi^2} + P, \\ \frac{\partial Z}{\partial t} &= k_3 BX - k_5 Z + D_Z \frac{\partial^2 Z}{\partial \xi^2}, \end{aligned} \quad (1)$$

где X – концентрация бромистой кислоты HBrO_2 , Y – концентрация бромидов Br^- , Z – концентрации церия IV, D_X , D_Y , D_Z – коэффициенты диффузии компонентов, f – стехиометрический коэффициент.

Стационарные состояния системы. Однородное стационарное состояние системы (1) определяется выражениями:

$$k_1 AY_0 - k_2 X_0 Y_0 + k_3 BX_0 - 2k_4 X_0^2 = 0, \quad -k_1 AY_0 - k_2 X_0 Y_0 + f k_5 Z_0 + P = 0, \quad k_3 BX_0 - k_5 Z_0 = 0, \quad (2)$$

где X_0 , Y_0 , Z_0 – концентрации компонентов, k_1 , k_2 , k_3 , k_4 , k_5 – константы скорости реакции.

Для входных параметров [7]: $A = B = 6 \cdot 10^{-2}$, $k_1 = 8 \cdot 10^9$, $k_2 = 2 \cdot 10^9$, $k_3 = 2,1$, $k_4 = 4 \cdot 10^7$, $k_5 = 10^{-4}$ проведены вычислительные эксперименты по стационарному состоянию системы для различных

¹ Прокудина Людмила Александровна – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра прикладной математики, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: prokudina-la@mail.ru

значений стехиометрического коэффициента (табл. 1). Численное решение системы (2) проведено с использованием пакета Matlab как для случая отсутствия внешнего воздействия на систему, так и при внешнем воздействии.

Получены следующие результаты:

1. Найденные стационарные решения являются положительными, что соответствует физическому смыслу автоколебательной химической реакции, которую описывает система (1).

2. С ростом величины стехиометрического коэффициента увеличиваются значения величин X_0 , Y_0 , Z_0 .

3. Внешнее воздействие при одних и тех же входных параметрах системы изменяет стационарное состояние (табл. 2).

Таблица 1

Стационарные решения системы в отсутствии внешнего воздействия

f	$X_0, 10^{-8}$	$Y_0, 10^{-17}$	$Z_0, 10^{-15}$
0,15	0,1811	0,0071	0,2282
0,25	0,1969	0,0129	0,2481
0,35	0,2126	0,0195	0,2679
0,45	0,2284	0,0270	0,2878
0,55	0,2441	0,0352	0,3076
0,65	0,2599	0,0443	0,3274
0,75	0,2756	0,0543	0,3473
0,85	0,2914	0,0650	0,3671
0,95	0,3071	0,0766	0,3870
1,05	0,3229	0,0890	0,4068
1,15	0,3386	0,1022	0,4267
1,25	0,3544	0,1163	0,4465
1,35	0,3701	0,1312	0,4664

Таблица 2

Стационарные решения системы при внешнем воздействии $P = 0,8$

f	$X_0, 10^{-4}$	$Y_0, 10^{-8}$	$Z_0, 10^{-10}$
0,15	0,99959264	0,16659767	0,12594867
0,25	0,99959343	0,16659793	0,12594877
0,35	0,99959421	0,16659819	0,12594887
0,45	0,99959500	0,16659845	0,12594897
0,55	0,99959579	0,16659872	0,12594906
0,65	0,99959657	0,16659898	0,12594916
0,75	0,99959736	0,16659924	0,12594926
0,80	0,99959775	0,16659937	0,12594931
0,85	0,99959815	0,16659950	0,12594936
0,95	0,99959893	0,16659977	0,12594946
1,05	0,99959972	0,16660003	0,12594956
1,15	0,99960051	0,16660029	0,12594966
1,25	0,99960129	0,16660055	0,12594976
1,35	0,99960208	0,16660081	0,12594986

Из приведенных данных табл. 2 видно, что при величине внешнего параметра, равного $P = 0,8$, отмечается практически одно значение стационарного состояния для всего диапазона стехиометрического коэффициента. Величина внешнего параметра $P = 0,8$ зафиксирована в экспериментах Жаботинского [1] и является практически предельным значением, при котором возможны результаты, имеющие физический смысл. Для значений внешнего параметра $P < 0,8$ такого результата не наблюдается, стационарные решения для различных f положительны и различны.

Колебательный режим. Для вышеприведенных в табл. 1 и 2 стационарных состояний, значений стехиометрического коэффициента из диапазона $0,15 \leq f \leq 1,35$ численно исследована методом Рунге–Кутты система обыкновенных дифференциальных уравнений (1) без учета диффузии компонентов.

Получены следующие результаты:

1. В орегонаторе при отсутствии внешнего воздействия ($P = 0$) устанавливается колебательный режим (рис. 1). Из экспериментальных данных [1, 9, 10] известно, что форма колебаний определяется в основном начальными концентрациями компонентов. Система выходит на колебательный режим через некоторый промежуток времени после смешения реагентов.

2. С увеличением значения стехиометрического коэффициента время выхода на колебательный режим уменьшается.

3. Также время выхода на колебательный режим сокращается (рис. 2) в результате внешнего воздействия на систему.

4. При увеличении значения параметра P , что в натуральных экспериментах соответствует увеличению интенсивности облучения исходного состояния системы, отмечается уменьшение амплитуды колебаний, а также изменение периода колебаний.

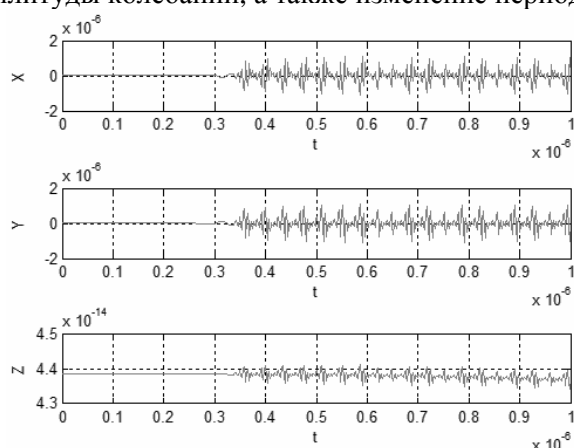


Рис. 1. Изменение концентраций компонентов при $f = 1,2, P = 0$

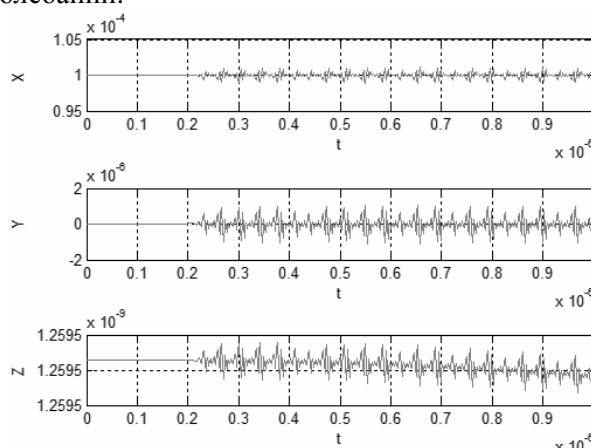


Рис. 2. Изменение концентраций компонентов при $f = 1,2, P = 0,8$

Влияние диффузии компонентов. В физико-химических, биохимических, биологических системах, где химические реакции сочетаются с диффузией компонентов, диффузия может играть и дестабилизирующую роль [8]. Так называемая диффузионная неустойчивость приводит к возникновению в исследуемых системах устойчивых пространственных структур. Стационарные структуры возникают в работающих реакторах и наблюдались в экспериментах при исследовании реакции Белоусова–Жаботинского. Первые экспериментальные режимы были получены в конце 60-х и начале 70-х годов 20 века как российскими учеными Жаботинским А.М., Заикиным А.Н., Вавилиным В.А. [9, 10] так и иностранными учеными Busse H.G. [11], Herschkowitz-Kaufman M. [12], Beck M.T., Varadi Z.B. [13].

Для изучения нелинейного развития возмущений в орегонаторе, полагая

$$X = X_0 + x, \quad Y = Y_0 + y, \quad Z = Z_0 + z$$

осуществим переход от системы (1) к системе в возмущениях x, y, z :

$$LU = N, \tag{3}$$

где

$$U = \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad L = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \tau} - D_X \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - a_1 & -a_2 & 0 \\ -b_2 & \frac{\partial}{\partial \tau} - D_Y \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - b_1 & b_3 \\ -c_1 & 0 & \frac{\partial}{\partial \tau} - D_Z \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - c_2 \end{pmatrix}, \quad N = \begin{pmatrix} a_3xy + a_4x^2 \\ b_4xy \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Исследуя устойчивость стационарного состояния (2) по отношению к возмущениям

$$x(\xi, t) = \exp(k\xi - \omega t),$$

получим дисперсионное уравнение

$$\begin{vmatrix} a_1 + i\omega - k^2 D_X & a_2 & 0 \\ b_2 & b_1 + i\omega - k^2 D_Y & b_3 \\ c_1 & 0 & c_2 + i\omega - k^2 D_Z \end{vmatrix} = 0$$

или соответственно

$$\omega^3 - ip_1\omega^2 + p_2\omega - ip_3 = 0, \quad (4)$$

где $\omega = \omega_r + i\omega_i$, ω_r – частота возмущений, ω_i – скорость роста возмущений.

Коэффициенты дисперсионного уравнения (4) имеют вид:

$$\begin{aligned} p_1 &= a_1 + b_1 + c_2 - K^2(D_X + D_Y + D_Z), \\ p_2 &= (a_1 + b_1 - K^2(D_X + D_Y))(c_2 - K^2 D_Z) + (a_1 - k^2 D_X)(b_1 - K^2 D_Y) - a_2 b_2, \\ p_3 &= (a_1 - K^2 D_X)(b_1 - K^2 D_Y)(c_2 - K^2 D_Z) + a_2 b_3 c_1 - a_2 b_2 (c_2 - K^2 D_Z), \\ a_1 &= -k_2 Y_0 + k_3 B - 4k_4 X_0, \quad a_2 = k_1 A - k_2 X_0, \quad a_3 = -k_2, \quad a_4 = -2k_4, \\ b_1 &= -k_1 A - k_2 X_0, \quad b_2 = -k_2 Y_0, \quad b_3 = fk_5, \quad b_4 = -k_2, \quad c_1 = k_3 B, \quad c_2 = -k_5, \end{aligned}$$

где K – волновое число.

Решение уравнения (4) проведено с использованием пакета Matlab. Вычислительный эксперимент по расчету частоты, скорости роста возмущений осуществлен для коэффициентов диффузии $D_X = 0,008$, $D_Y = 0,016$, $D_Z = 0,00001$.

Получены следующие результаты:

1. Для диапазона стехиометрического коэффициента $0,15 \leq f \leq 1,35$ представленная модель орегонатора с учетом диффузии компонентов неустойчива, скорость роста возмущений $\omega_i > 0$ (табл. 3).

2. Необходимо выделить два неустойчивых режима:

- 1) смена устойчивости $\omega_i > 0$, $\omega_r = 0$;
- 2) колебательная неустойчивость $\omega_i > 0$, $\omega_r > 0$.

3. Для различных значений волнового числа получаются различные колебательные режимы. Кривые скорости роста возмущений для режима смены устойчивости показаны на рис. 3.

4. Стехиометрический коэффициент является бифуркационным параметром системы, при изменении которого в орегонаторе меняется тип неустойчивости. С увеличением стехиометрического коэффициента возрастает скорость роста возмущений в системе, она становится более неустойчивой (рис. 3).

Таблица 3

Значения частоты и скорости роста возмущений для $f = 0,55$

K	$\omega_r, 10^{-8}$	ω_i
1	-0,0056	0,2910
3	0	0,3594
5	0,0777	0,4962
7	0	0,7015
9	0,0444	0,9752
11	0,0888	1,3173
13	-0,0888	1,7278
15	-0,3553	2,2068
17	-0,3997	2,7542
19	-0,0444	3,3700

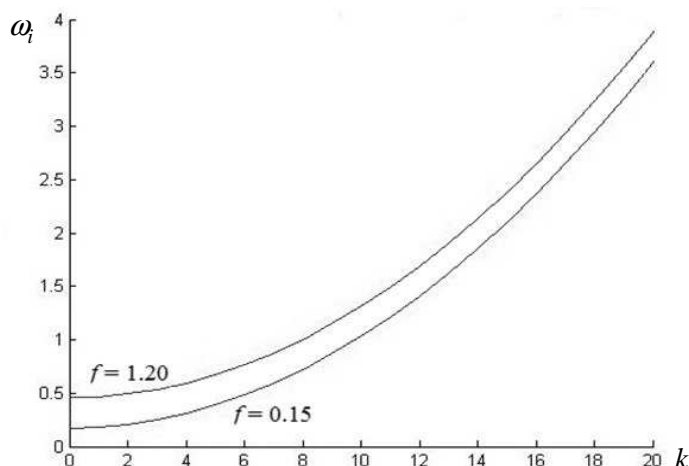


Рис. 3. Зависимость скорости роста возмущений от волнового числа для различных значений f

Заключение. Показано изменение стационарного состояния и режима колебаний автокаталитической системы (орегонатора) при внешнем воздействии. Установлен диапазон значений стехиометрического коэффициента, при котором система с диффузионным типом связи неустойчива. Время выхода на колебательный режим сокращается с увеличением стехиометрического параметра.

Литература

1. Жаботинский, А.М. Концентрационные автоколебания / А.М. Жаботинский – М.: Наука, 1974. – 178 с.
2. Volpert, V. Reaction-diffusion waves in biology / V. Volpert, S. Petrovskii // *Physics of Life Reviews*. – 2009. – Vol. 6. – P. 267–310.
3. Generation of oscillations by the p53-MDM2 feedback loop: A theoretical and experimental study / R. Lev Bar-Or, R. Maya, L. Segel *et al.* // *PNAS*. – 2000. – Vol. 97, № 21. – P. 11250–11255.
4. Численное моделирование ультрадианных колебаний в биологической системе p53-MDM2 в условиях стресса / О.Ф. Воропаева, С.В. Сенчукова, К.В. Бродт и др. // *Математическое моделирование*. – 2014. – Т. 26, № 11. – С. 105–122.
5. Индукция p53-зависимого апоптоза под действием ионизирующего излучения в лимфоидных клетках больных в-клеточным хроническим лимфолейкозом / И.В. Абраменко, А.В. Завгородняя, В.И. Балан и др. // *Онкология*. – 2008. – Vol. 10, № 2. – С. 225–229.
6. Прокудина, Л.А. Нелинейное развитие возмущений автокаталитической реакции, осложненной диффузией / Л.А. Прокудина, Л.П. Холпанов // *Теоретические основы химической технологии*. – 2004. – Т. 38, № 6. – С. 675–682.
7. Edelson, D. Mechanistic details of the Belousov–Zhabotinskii oscillations / D. Edelson, R.J. Field, R.M. Noyes // *International Journal of Chemical Kinetics*. – 1975 – Vol. 7. – Issue 3. – P. 417–432.
8. Прокудина, Л.А. Моделирование неустойчивости орегонатора с диффузией / Л.А. Прокудина // *Нелинейный мир*. – 2014. – Т. 12, № 1. – С. 042–047.
9. Жаботинский, А.М. Периодические реакции окисления в жидкой фазе / А.М. Жаботинский // *ДАН СССР*. – 1964. – Т. 157. – С. 392–395.
10. Вавилин В.А. / В.А. Вавилин, А.М. Жаботинский, А.Н. Заикин // *Журнал физической химии*. – 1968. – № 42. – С. 3091.
11. Busse, H.G. A spatial periodic homogeneous chemical reaction / H.G. Busse // *J. Phys. Chem.* – 1969. – Vol. 73. – Issue 3. – P. 750–750.
12. Herschkowitz-Kaufman, M. Structures dissipatives dans une reaction chimique onhomogene / M. Herschkowitz-Kaufman // *Comp. Rend. Acad. Sci.* – 1970. – C270, № 12. – P. 1049–1052.
13. Beck M.T. One, two and three-dimensional spatially periodic chemical reactions / M.T. Beck, Z.B. Varadi // *Nature Phys. Sci.* – 1972. – Vol. 235. – С. 15–16.

Поступила в редакцию 10 ноября 2014 г.

EFFECTS OF EXTERNAL INFLUENCES ON THE DEVELOPMENT OF DISTURBANCES IN THE OREGONATOR WITH DIFFUSIONL.A. Prokudina¹

The article presents the Field-Noyes-Körös model of the Belousov–Zhabotinsky reaction, called an oregonator, on account of the component diffusion and external influences. Of great scientific importance are the works of such scientists as A.M. Zhabotinsky and V.A. Vavilin devoted to the deformation of the region of oscillation existence and the production of complex oscillation modes.

The effect of external influences on the initial state of a chemically reacting system enables to produce new reagents, unusual for the original set, its stationary states, as well as to control oscillations modes. Stationary solutions of the system have been found corresponding to its physical meaning for different values of the stoichiometric ratio both in case of absence of external influences and under external influence. The dispersion equation is derived which enables to calculate the rate of the perturbation growth in the system and the oscillation frequency.

The results of computational experiments made on the system instability on account of components diffusion and external influences are presented. Rates of perturbation growth for different values of the stoichiometric ratio have been calculated. Two unstable modes have been distinguished, such as the stability change and the oscillatory instability. It is shown that the time of the system transition to the vibrational mode decreases with the increase of the values of the stoichiometric ratio and under external influences.

Keywords: oregonator; instability; perturbation; diffusion; vibrational modes; the external influence.

References

1. Zhabotinskiy A.M. *Kontsentratsionnye avtokolebaniya* (Concentration autooscillations). Moscow, Nauka Publ., 1974. 178 p. (in Russ.).
2. Volpert V., Petrovskii S. Reaction-diffusion waves in biology. *Physics of Life Reviews*. 2009. Vol. 6. pp. 267–310.
3. Lev Bar-Or R., Maya R., Segel L., Alon U., Levina A.J., Oren M. Generation of oscillations by the p53-MDM2 feedback loop: A theoretical and experimental study. *PNAS*. 2000. Vol. 97, no. 21. pp. 11250–11255.
4. Voropaeva O.F., Senchukova S.R., Brodt K.V., Garbuzov K.E., Melnitchenko A.V., Starikova A.A. Numerical Simulation of Ultradian Oscillations in p53-Mdm2-Network under Stress Conditions. *Matematicheskoe Modelirovanie*. 2014. Vol. 26, no. 11. pp. 105–122. (in Russ.).
5. Abramenko I.V., Zavgorodnyaya A.V., Balan V.I., Krechok I.A., Chumak A.A. *Onkologiya*. 2008. Vol. 10, no. 2. pp. 225–229.
6. Prokudina L.A., Kholpanov L.P. *Teoreticheskie osnovy khimicheskoy tekhnologii*. 2004. Vol. 38, no. 6. pp. 675–682. (in Russ.).
7. Edelson D., Field R. J., Noyes R.M. Mechanistic details of the Belousov–Zhabotinskii oscillations. *Int. J. Chem. Kin.* 1975. Vol. 7. Issue 3. pp. 417–432. DOI: 10.1002/kin.550070309.
8. Prokudina L.A. *Nelineinyi mir* (Nonlinear World). 2014. Vol. 12, no. 1. pp. 042–047. (in Russ.).
9. Zhabotinskiy A.M. *DAN SSSR*. 1964. Vol. 157. pp. 392–395. (in Russ.).
10. Vavilin V.A., Zhabotinskiy A.M., Zaikin A.N. *Zhurnal fizicheskoy khimii*. 1968. no. 42. p. 3091.
11. Busse H.G. *J. Phys. Chem.* 1969. Vol. 73. Issue 3. p. 750–750. DOI: 10.1021/j100723a049.
12. Herschkowitz-Kaufman M. Structures dissipatives dans une reaction chimique onhomogene. *Comp. Rend. Acad. Sci.* 1970. C270, no. 12. pp. 1049–1052.
13. Beck M.T., Varadi Z.B. One, two and three-dimensional spatially periodic chemical reactions. *Nature Phys. Sci.* 1972. Vol. 235. no. 53. pp. 15–16. doi:10.1038/physci235015a0.

Received 10 November 2014

¹ Prokudina Lyudmila Alexandrovna is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Applied Mathematics Department, South Ural State University. E-mail: prokudina-la@mail.ru

ПРИМЕСИ УГЛЕРОДА В ПАРАМАГНИТНОМ ГЦК-ЖЕЛЕЗЕ: AB INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ¹

Я.М. Ридный², А.А. Мирзоев³, Д.А. Мирзаев⁴

С использованием программного пакета WIEN2k проведено *ab initio* моделирование равновесной структуры и свойств ГЦК-железа с примесями углерода. Предложена модель, способная реалистично описать парамагнитное состояние ГЦК-железа. Вычислены энергия растворения углерода и энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе до четвертой конфигурационной сферы. Показано, что во всех сферах наблюдается отталкивание, причем оно максимально во второй, а минимально в третьей координационной сфере.

Ключевые слова: ГЦК-железо; парамагнитное состояние; первопринципное моделирование; примеси углерода; WIEN2k; метод LAPW.

Введение

Углеродистая сталь – наиболее распространённый конструкционный материал в машиностроении – представляет собой раствор углерода в железе. Обычно используется сталь на основе низкотемпературной ОЦК-фазы железа. Поэтому поведение углерода в сплавах на основе ОЦК-железа изучено достаточно хорошо [1]. Микроструктура сталей зависит от концентрации углерода, взаимного расположения атомов углерода и условия охлаждения изделий от температуры аустенизации, выше которой железо существует в виде ГЦК-фазы (γ -Fe). Эта парамагнитная фаза термодинамически стабильна в интервале температур между 911 и 1391 °С. Однако кристаллы γ -фазы можно получить при старении сплавов Fe-Cu. Выделяющиеся при распаде мелкие частицы γ -Fe в этом случае удается сохранить при 0 К, и именно благодаря их исследованию стало известно, что при низких температурах γ -Fe является антиферромагнетиком с точкой Нееля 70 К и атомным магнитным моментом 0,6–0,8 μ_B [2–3].

Современные методы компьютерного моделирования, основанные на теории функционала плотности (DFT), позволяют с достаточной точностью описать энергию растворения и взаимодействие между атомами углерода в ферромагнитной фазе ОЦК-железа. При описании парамагнитного состояния железа, в котором локальные магнитные моменты разупорядочены, прямое использование расчетных методов DFT затруднено. Это связано с тем, что указанная теория использует зонную модель магнетизма и способна описывать лишь коллинеарные магнитные структуры кристаллов. В работе Окатова [4] проводилось моделирование парамагнитного состояния ОЦК и ГЦК-железа двумя способами: методом когерентного потенциала (DLM) [5] и на основе использования спин-спиральных (SS) [6] магнитных упорядочений с различными волновыми векторами q , вращение которых происходит вокруг направления бейновской деформации (001). Было получено, что в ГЦК-железе наиболее стабильными являются: антиферромагнитное однослойное АФМ1-состояние и состояние, полученное методом SS с $q = 0,3$. Энергию растворения углерода в различных магнитных фазах ГЦК-железа экспериментально определить довольно сложно [7–10]. Поэтому неоднократно совершались попытки её вычисления методами компьютерного моделирования [1, 11–13]. Однако в этих работах вычисления проводились только для упорядоченных коллинеарных магнитных состояний, тогда как реальное парамагнитное ГЦК-железо является магнитнеупорядоченным. В парамагнитном состоянии внутри объёма кристалла вследствие теплового движения атомных моментов могут возникать различные локальные магнитные структуры (локальные флуктуации магнитного порядка). Если атом углерода попада-

¹ Работа поддержана грантом РФФИ № 14-03-00618-а.

² Ридный Ярослав Максимович – аспирант, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: yaroslav@physics.susu.ac.ru

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

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

⁴ Мирзаев Джалал Аминович – доктор физико-математических наук, профессор, кафедра физического металловедения и материаловедения, Южно-Уральский государственный университет.

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

ет в области с различным магнитным порядком, он может обладать различной энергией растворения, а средняя энергия по сплаву будет представлять собой усреднённое значение по таким локальным параметрам. Впервые энергия растворения углерода в парамагнитном состоянии γ -железа была рассчитана в работе [14], где было показано, что адекватное описание магнитного состояния существенно влияет на результаты расчета. Однако в указанной работе не было изучено влияние парамагнетизма на энергию взаимодействия между атомами углерода, растворёнными в ГЦК-железе. Как хорошо известно, взаимодействие между атомами углерода определяет степень упорядочения в расположении углерода и влияет на характер $\gamma \rightarrow \alpha$ превращения в сталях. К сожалению, экспериментальное изучение данного взаимодействия в ГЦК-железе довольно затруднительно [7, 15–23], потому что возможна только качественная оценка результатов. Попытки вычисления данных энергий методами компьютерного моделирования проводились в работах [11, 24–25]. В работах [24–25] моделирование ГЦК-железа проводилось в немагнитном (НМ) состоянии, которое никак не учитывает магнитные эффекты. В [14] моделирование проводилось в антиферромагнитном двухслойном (АФМД) состоянии. Это состояние было рассмотрено в нашей предыдущей работе [26], в которой было показано, что АФМД-состояние описывает парамагнитное ГЦК-железо недостаточно точно. Поэтому в настоящей работе представлены результаты расчетов энергии растворения примесей углерода и их взаимодействия между собой в парамагнитном γ -Fe.

Методика расчетов

В данной работе предложен метод моделирования парамагнитного состояния. Расчёты проводились из первых принципов полнопотенциальным методом LAPW, с учетом обобщенного градиентного приближения PBE-GGA в программном пакете WIEN2k [27], обеспечивающим высокую точность расчета полной энергии при минимальном количестве подгоночных параметров. Это наиболее точные методы, используемые в рамках теории функционала плотности DFT [28]. При интегрировании в обратном пространстве и вычислении электронной плотности использовалась схема Монхорста–Пака [29] с сеткой $4 \times 4 \times 4$ k -точек зоны Бриллюэна для оптимизации геометрических параметров, и с сеткой из $7 \times 7 \times 7$ k -точек для обеспечения точности расчёта в 1 мРб. Расчёты проводились при следующих значениях параметров моделирования [30]: параметр сходимости $K_{\max} = 5$ а.е.⁻¹, радиусы МТ-сфер $R_{\text{mt}}(\text{Fe}) = 2,00$ а.е., $R_{\text{mt}}(\text{C}) = 1,20$ а.е. Критерием сходимости во всех расчётах было достижение точности расчета полной энергии системы, заряда и силы взаимодействия между двумя атомами не менее 10^{-4} Рб, $10^{-3}e$ и 1 мРб/а.е. соответственно.

Температурный диапазон существования ГЦК-железа лежит выше 1000 К, но особенности программного пакета WIEN2k позволяют провести моделирование только основного состояния системы при 0 К. При объёмной минимизации по энергии нами было получено, что происходит образование упорядоченных магнитных структур, которые никак не могут учесть локальные флуктуации магнитного порядка и которые дают недостаточно точные результаты при вычислении энергии растворения углерода. Поэтому для моделирования использовались равновесные параметры решётки, взятые из экспериментальной работы Онинка [31] для $T = 1400$ К: $a = 3,667$ Å – для чистого ГЦК-Fe, $a = 3,687$ Å – для системы из 32 атомов железа и растворённого атома углерода и $a = 3,707$ Å – для системы из 32 атомов железа и двух растворённых атомов углерода.

Для определения энергии растворения углерода относительно фазы графита использовалась формула:

$$\Delta H = E(\text{Fe}_{32}\text{C}) - E(\text{Fe}_{32}) - E(\text{C}),$$

где $E(\text{Fe}_{32}\text{C})$ – энергии отрелаксированной суперячейки, состоящей из 32 атомов железа и одного атома углерода, находящегося в октапоре, $E(\text{Fe}_{32})$ – энергия суперячейки, состоящей из 32 атомов железа, а $E(\text{C})$ – энергия одного атома углерода в решётке графита. Параметры структуры графита были взяты из работы Джанг [1] ($a = 2,462$ Å, $c = 6,656$ Å, $\alpha = 90^\circ$, $\beta = 90^\circ$, $\gamma = 120^\circ$).

Для нахождения энергии взаимодействия между атомами углерода из энергии системы с двумя атомами углерода вычитается энергия двух суперячеек, содержащих одиночные атомы углерода, и суммируется с энергией беспримесной суперячейки ГЦК железа:

$$\Delta V = E(\text{Fe}_{32}\text{C}_2) - 2E(\text{Fe}_{32}\text{C}) + E(\text{Fe}_{32}),$$

где $E(\text{Fe}_{32}\text{C}_2)$ – энергия релаксированной суперячейки, состоящей из 32 атомов железа и двух атомов углерода, находящихся в октапорах.

Моделирование магнитных конфигураций парамагнетика

Различные неэквивалентные магнитные конфигурации были получены с помощью программы BINAR [32]. В основе алгоритма программы BINAR лежит анализ степени неупорядоченности множества случайных конфигураций, полученных «вбрасыванием» атомов железа со спином вверх в подрешетку атомов железа со спином вниз с использованием генератора случайных чисел (в нашей суперячейке из 32 атомов – 16 атомов со спином вверх и 16 со спином вниз). После этого производится отбраковка конфигураций, не соответствующих критерию неупорядоченности. В качестве такого критерия используется величина суммы квадратов отклонений числа разнородных пар атомов (первый сорт атомов - атомы железа со спином вверх, второй сорт - атомы железа со спином вниз) во второй координационной сфере для рассматриваемой конфигурации от статистических средних значений для полностью неупорядоченной бинарной смеси (критерий согласия Пирсона χ^2). В результате определялись магнитные конфигурации, в наибольшей степени соответствующие неупорядоченной ориентации атомных магнитных моментов по узлам суперячейки, и обеспечивающие равенство нулю полного магнитного момента ячейки.

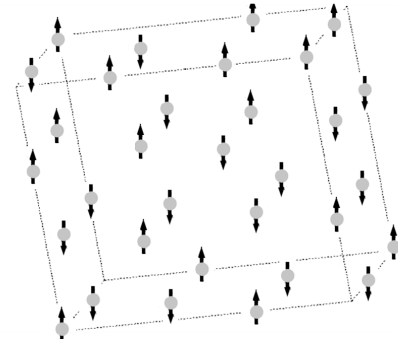


Рис. 1. Магнитная конфигурация суперячейки из 32 атомов железа, использованная для моделирования парамагнитного состояния в ГЦК-железе, обладающая наименьшей энергией. Стрелочками показаны спины атомов железа.

В данной работе, как и в предыдущей [33], с помощью программы BINAR были получены 16 различных неэквивалентных магнитных конфигураций. По известной разности полной энергии n -ой конфигурации системы и энергии системы в наиминимуме, основном состоянии (рис. 1), была вычислена каноническая статсумма (S):

$$S = \sum_{n=1}^5 \exp(-(E_n - E_0)/kT),$$

где E_0 – энергия основного состояния, а E_n – энергия системы в n -ом энергетическом состоянии; k – коэффициент Больцмана, $T = 1400$ К (средняя температура существования ГЦК-фазы железа).

Из отношения вклада в статсумму от данной конфигурации (S_n) к всей статсумме была вычислена вероятность существования магнитного состояния:

$$P_n = \frac{S_n}{S} = \frac{e^{-(E_n - E_0)/kT}}{S}.$$

Это позволяет вычислить усредненное по магнитным конфигурациям значение полной энергии суперячейки ГЦК-матрицы железа, содержащей один или два внедренных атома углерода по формуле:

$$\langle E \rangle = \sum_n E_n P_n.$$

Для расчётов выбирались 5 лежащих ниже остальных по энергии магнитных конфигураций (рис. 2). Вероятность существования остальных конфигураций была меньше 3 %, и их учёт не повлиял на конечные результаты, поэтому с целью оптимизации расчётов, в дальнейшем их не учитывали. Для тестирования методики был проведен расчет энергии растворения углерода в парамагнитном состоянии ГЦК-железа, величина которой оказалась равной $0,25 \pm 0,03$ эВ.

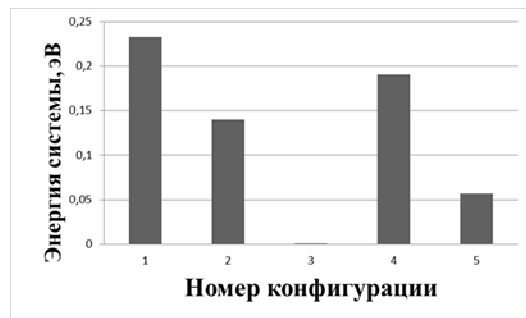


Рис. 2. График зависимости энергии системы от номера конфигурации. Энергии систем взяты относительно энергии самой низкой конфигурации

Полученное значение энергии растворения углерода в ГЦК-железе близко к экспериментальному и лучше согласуется с ним, чем результат, полученный в работе [14]. Это говорит о работоспособности выбранного нами метода и возможности моделирования им других энергетических характеристик. Интересно отметить, что при растворении углерод расталкивает ближайшие атомы железа не равномерно, а в зависимости от магнитной конфигурации, но в среднем на 5,1 %. Это меньше, чем при растворении в немагнитном (НМ) – 7,5 % и антиферромагнитном двух-

слоynom (АФМД) – 6,5 % состояниях [30]. Атом углерода расталкивает атомы железа в первых двух координационных сферах [14] и изменяет их магнитные моменты. Сравнение наших данных для магнитных моментов и искажений решётки атомов ГЦК-железа в первых двух координационных сферах от атома углерода с данными Пономарёвой [14] проведено в табл. 1.

Таблица 1

Магнитные моменты и искажения решётки атомов ГЦК-железа в первых двух координационных сферах от атома углерода.

Координационная сфера	Искажение решётки, %		Магнитный момент атомов железа, μ_B	
	Данная работа	[14]	Данная работа	[14]
1	5,1	5,7	1,85	1,66
2	1	1,2	2,29	2,22

Из табл. 1 видно качественное согласие наших результатов с данными работы [14]. Внедренный атом углерода уменьшает магнитный момент атомов железа в первой координационной сфере и увеличивает во-второй.

Энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе можно вычислить экспериментально [7, 15–23] для первых двух координационных сфер (рис. 3). Наиболее точные значения энергий взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе получены на основе моделирования методом Монте-Карло мёсбауэровских спектров ГЦК сплавов Fe-C [15–18]. В то же время, многочисленные термодинамические расчеты [7, 19–23], основанные на различных модельных представлениях о взаимодействии между атомами углерода, приводят к сильно отличающимся результатам. Все указанные литературные данные о значениях энергии взаимодействия между атомами углерода, а также результаты, полученные в данной работе, представлены в табл. 2.

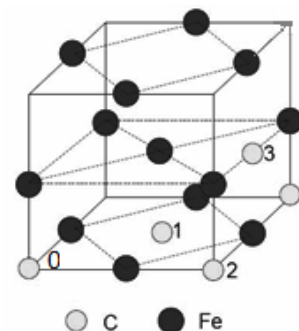


Рис. 3. Возможные расположения атомов углерода в суперячейке из 32 атомов железа. Атомы железа чёрным цветом, а углерода светлым. Отчёт идёт от атома номер ноль

Таблица 2

Энергии взаимодействия между атомами углерода в ГЦК-железе, эВ

Номер коор. сферы	1	2	3	4
Мёсбауэр. спектр. [15–18]	0,036–0,115	0,075–0,169	–	–
Термодинамический эксп. [7, 19–23]	0,065–1,55	–	–	–
Данная работа	0,06	0,2	0,01	0,05

Из табл. 2 видно, что наиболее сильно отталкивают друг друга атомы углерода, располагающиеся во второй координационной сфере друг относительно друга. Значительно слабее отталкивание между атомами С в первой и особенно в третьей, координационной сфере. Достоверность полученного результата подтверждает качественное согласие с данными мёсбауэровской спектроскопии.

Заключение

1. Предложена методика усреднения результатов моделирования по наимизшим по энергии магнитным конфигурациям, наиболее близким к парамагнитному беспорядку. Энергия растворения углерода в парамагнитном состоянии γ -Fe составила $0,25 \pm 0,03$ эВ. Данное значение энергии неплохо совпадает с экспериментальными результатами, что говорит о работоспособности методики.

2. Показано, что после внедрения в решётку парамагнитного γ -железа атом углерода раздвигает ближайшие атомы железа в среднем на 5,1 %, что меньше, чем при растворении в немагнитном (7,5 %) и АФМД (6,5 %) состояниях железа.

3. При растворении углерода в ГЦК решетке железа происходит снижение среднего магнитного момента на атом железа в первой координационной сфере и увеличение во второй.

4. Проведен расчет зависимости энергии взаимодействия между атомами углерода от расстояния между ними в парамагнитном состоянии ГЦК-железа. Показано, что взаимодействие

между атомами углерода носит отталкивающий характер, причем оно максимально во второй, а минимально в третьей координационной сфере.

5. Полученные нами значения энергии взаимодействия между атомами углерода существенно отличаются от значений энергии полученных в большинстве термодинамических расчетов.

Литература

1. Jiang, D.E. Carbon dissolution and diffusion in ferrite and austenite from first principles / D.E. Jiang, E.A. Carter // *Physical Review B*. – 2003. – Vol. 67. – P. 214103.
2. Acet, M. The Role of the Nature of Magnetic Coupling on the Martensitic Transformation in Fe-Ni / M. Acet, E.F. Wassermann, K. Andersen *et al.* // *Journal de Physique IV France*. – 1997. – Vol. 7, № C5. – P. 401–404.
3. Weiss, R.J. Components of the Thermodynamic Functions of Iron / R.J. Weiss, K.J. Tauer // *Physical Review*. – 1956. – Vol. 102, № 6. – P. 1491–1495.
4. Effect of magnetic state on the γ - α transition in iron: First-principles calculations of the bain transformation path / S.V. Okatov, V.N. Urtsev, M.I. Katsnelson *et al.* // *Physical Review B*. – 2009. – Vol. 79. – P. 094111.
5. A first-principles theory of ferromagnetic phase transitions in metals / B.L. Gyorffy, A.J. Pindor, J. Staunton *et al.* // *Journal of Physics F: Metal Physics*. – 1985. – Vol. 15, № 6. – P. 1337–1386.
6. Marsman, M. Broken symmetries in the crystalline and magnetic structures of g-iron / M. Marsman, J. Hafner // *Physical Review B*. – 2002. – Vol. 66. – P. 224409.
7. Shiflet, G.J. Further considerations on the thermodynamics of the proeutectoid ferrite reaction in Fe-C alloys / G.J. Shiflet, J.R. Bradley, H.I. Aaronson // *Metallurgical Transactions A*. – 1984. – Vol. 15. – P. 1287–1288.
8. Gustafson, P. Thermodynamic evaluation of the Fe-C system / P. Gustafson // *Scandinavian Journal of Metallurgy*. – 1985. – Vol. 14. – Issue 5. – P. 259–267.
9. Могутнов, Б.М. Термодинамика сплавов железа / Б.М. Могутнов, И.А. Томили, Л.А. Шварцман. – Москва: Металлургия, 1984. – 206 с.
10. Lobo, J.A. Thermodynamics of carbon in austenite and Fe-Mo austenite / J.A. Lobo, G.H. Geiger // *Metallurgical Transactions A*. – 1976. – Vol. 7, № 8. – P. 1359–1364.
11. First-principles study of helium, carbon, and nitrogen in austenite, dilute austenitic iron alloys, and nickel / D.J. Hepburn, D. Ferguson, S. Gardner, G.J. Ackland // *Physical Review B*. – 2013. – Vol. 88. – P. 024115.
12. Magnetism and Local Distortions near Carbon Impurity in g-Iron / D.W. Boukhalov, Y.N. Gornostyrev, M.I. Katsnelson, A.I. Lichtenstein // *Physical Review Letters*. – 2007. – Vol. 99. – P. 247205.
13. Slane, J.A. Experimental and Theoretical Evidence for Carbon-Vacancy Binding in Austenite / J.A. Slane, C. Wolverton, R. Gibala // *Metallurgical and Materials Transactions A*. – 2004. – Vol. 35, № 8. – P. 2239–2245.
14. Ponomareva, A.V. Ab initio calculation of the solution enthalpies of substitutional and interstitial impurities in paramagnetic fcc Fe / A.V. Ponomareva, Yu.N. Gornostyrev, I.A. Abrikosov // *Physical Review B*. – 2014. – Vol. 90. – P. 014439
15. Надутов, В.М. Межатомное взаимодействие и распределение атомов внедрения в железо-азотистых и железо-углеродистых сплавах: автореферат дис. д-ра физ.-мат. наук / В.М. Надутов. – Киев: ИМФ НАН Украины им. Г.В.Курдюмова, 1997. – 55 с.
16. Гаврилюк, В.Г. Распределение углерода в сталях / В.Г. Гаврилюк. – Киев: Наукова Думка, 1987. – С. 208.
17. Oda, K. Local interactions in carbon-carbon and carbon-M (M: Al, Mn, Ni) atomic pairs in FCC γ -iron / K. Oda, H. Fujimura, H. Ino // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 1994. – Vol. 6, no. 3. – P. 679.
18. Blanter, M.S. Interaction of interstitial carbon atoms in austenite / M.S. Blanter // *Acta Metallurgica*. – 1999. – Vol. 41. – P. 7–8.
19. Могутнов, Б.М. Термодинамика железо-углеродистых сплавов / Б.М. Могутнов, И.А. Томили, Л.А. Шварцман. – М.: Металлургия, 1972. – 328 с.
20. Mou, Y. The carbon-carbon interaction energy in alpha Fe-C alloys / Y. Mou, H.I. Aaronson // *Acta Metallurgica*. – 1989. – Vol. 37. – Issue 3. – P. 757–765.

21. Кожеуров, В.А. К термодинамике растворов внедрения / В.А. Кожеуров // Известия ВУЗов. Черная металлургия. – 1965. – № 2. – С. 10–16.
22. Dunn, W.W. The Application of Quasi-chemical Solid Solution Model to Carbon Austenite / W.W. Dunn, R.B. McLellan // Metall Trans. – 1970. – Vol. 1, № 5. – P. 1263–1265.
23. McLellan, R.B. The C-C interaction energy in iron-carbon solid solutions / R.B. McLellan // Acta Metallurgica. – 1987. – Vol. 35, № 8. – С. 2151–2156.
24. Timoshevskii, A.N. Ab-initio modeling of the short range order in Fe-N and Fe-C austenitic alloys / A.N. Timoshevskii, S.O. Yablonovskii // Functional Materials. – 2011. – Vol. 18, № 4. – P. 517–522.
25. First-principles study of Mn, Al and C distribution and their effect on stacking fault energies in fcc Fe / N.I. Medvedeva, M.S. Park, D.C.V. Aken, J.E. Medvedeva // Journal of Alloys and Compounds. – 2014. – Vol. 582. – P. 475–482.
26. Ридный, Я.М. Расчёт из первых принципов энергий взаимодействия между атомами углерода в антиферромагнитном двухслойном ГЦК-железе / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2014. – Т. 6, № 4. – С. 53–58.
27. Schwarz, K. Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material science / K. Schwarz, P. Blaha, G.K.H. Madsen // Computer Physics Communications. – 2002. – Vol. 147. – P. 71–76.
28. Cottenier, S. Density Functional Theory and the family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction / S. Cottenier. – 2004. [http://www.wien2k.at/reg_user/textbooks // DFT_and_LAPW-2_cottenier.pdf].
29. Monkhorst, H.J. Special points for Brillouin-zone integrations / H.J. Monkhorst, J.D. Pack // Physical Review B. – 1976. – Vol. 13, № 12. – P. 5188–5192.
30. Ридный, Я.М. Ab-initio моделирование влияния ближнего окружения примесей углерода на энергию их растворения в ГЦК-железе / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Т. 5, № 2. – С. 108–116.
31. The lattice parameters of austenite and ferrite in Fe-C as functions of carbon concentration and temperature / M. Onink, C.M. Brakman, F.D. Tichelaar *et al.* // Scripta Metallurgica Et Materialia. – 1993. – Vol. 29, № 8. – P. 1011–1016.
32. Деянов, Р.З. ODSS(Ordered-Disordered-Solid-Solution) Ver.1.–binar Программа расчета неупорядоченных сверхячеек для моделирования твердых растворов замещения / Р.З. Деянов, Н.Н. Еремин, В.С. Урусов. – Москва, 2006–2007. [<http://cryst.geol.msu.ru/odss/binar.pdf>].
33. Ридный, Я.М. Ab-initio моделирование энергии растворения атома углерода в парамагнитном ГЦК-железе / Я.М. Ридный, А.А. Мирзоев, Д.А. Мирзаев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2014. – Т. 6, № 3. – С. 86–91.

Поступила в редакцию 7 марта 2015 г.

CARBON IMPURITIES IN PARAMAGNETIC FCC IRON: AB INITIO SIMULATION OF ENERGY PARAMETERS**Ya.M. Ridnyi¹, A.A. Mirzoev², D.A. Mirzaev³**

Ab initio simulation of equilibrium structure and FCC-iron characteristics was carried out using WIEN2k software package. We propose a model that can realistically describe the paramagnetic state fcc iron. Calculated the energy of dissolution of carbon and energy interaction between carbon atoms in fcc iron to the fourth configuration spheres. It is shown that in all spheres there is repulsion, and it is the highest in the second sphere and the lowest in the third coordination sphere.

Keywords: FCC-iron; first principle simulation; carbon impurity; WIEN2k; method LAPW.

References

1. Jiang D.E., Carter E.A. Carbon dissolution and diffusion in ferrite and austenite from first principles. *Physical Review B*. 2003. Vol. 67. pp. 214103.
2. Acet M., Wassermann E.F., Andersen K., Murani A., Scharpf O. *Journal de Physique IV France*. 1997. Vol. 7, no. C5. p. 401–404.
3. Weiss R.J., Tauer K.J. Components of the Thermodynamic Functions of Iron. *Physical Review*. 1956. Vol. 102, no. 6. pp. 1491–1495.
4. Okatov S.V., Urtsev V.N., Katsnelson M.I., Kuznetsov A.R., Gornostyrev Yu.N. Effect of magnetic state on the γ - α transition in iron: First-principles calculations of the bain transformation path. *Physical Review B*. 2009. Vol. 79. p. 094111. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.79.094111>.
5. Gyorffy B.L., Pindor A.J., Staunton J., Stocks G.M., Winter H. A first-principles theory of ferromagnetic phase transitions in metals. *Journal of Physics F: Metal Physics*. 1985. Vol. 15, no. 6. pp. 1337–1386.
6. Marsman M., Hafner J. Broken symmetries in the crystalline and magnetic structures of g-iron. *Physical Review B*. 2002. Vol. 66. pp. 224409.
7. Shiflet G.J., Bradley J.R., Aaronson H.I. Further considerations on the thermodynamics of the proeutectoid ferrite reaction in Fe-C alloys. *Metallurgical Transactions A*. 1984. Vol. 15. pp. 1287–1288.
8. Gustafson P. Thermodynamic evaluation of the Fe-C system. *Scandinavian Journal of Metallurgy*. 1985. Vol. 14. Issue 5. pp. 259–267.
9. Mogutnov B.M., Tomilin I.A., Shvartsman L.A. *Termodinamika splavov zheleza* (Thermodynamics of ferroalloys). Moscow, Metallurgiya Publ., 1984. 206 p. (in Russ.).
10. Lobo J.A., Geiger G.H. Thermodynamics of carbon in austenite and Fe-Mo austenite. *Metallurgical Transactions A*. 1976. Vol. 7, no. 8. pp. 1359–1364.
11. Hepburn D.J., Ferguson D., Gardner S., Ackland G.J. First-principles study of helium, carbon, and nitrogen in austenite, dilute austenitic iron alloys, and nickel. *Physical Review B*. 2013. Vol. 88. P. 024115.
12. Boukhalov D.W., Gornostyrev Y.N., Katsnelson M.I., Lichtenstein A.I. Magnetism and Local Distortions near Carbon Impurity in g-Iron. *Physical Review Letters*. 2007. Vol. 99. p. 247205.
13. Slane J.A., Wolverton C., Gibala R. Experimental and Theoretical Evidence for Carbon Vacancy Binding in Austenite. *Metallurgical and Materials Transactions A*. 2004. Vol. 35, no. 8. pp. 2239–2245.
14. Ponomareva A.V., Gornostyrev Yu.N., Abrikosov I.A. Ab initio calculation of the solution enthalpies of substitutional and interstitial impurities. *Physical Review B*. 2014. Vol. 90. P. 014439.

¹ Ridnyi Yaroslav Maksimovich is Post-graduate Student, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.
E-mail: yaroslav@physics.susu.ac.ru

² Mirzoev Aleksander Aminulaevich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

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

³ Mirzaev Dzhahal Aminulovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Department of Physical Metallurgy and Material Science, Southern Ural State University.

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

15. Nadutov V.M. *Mezhatomnoe vzaimodeystvie i raspredelenie atomov vnedreniya v zhelezo-azotistykh i zhelezo-uglerodistykh splavakh. Avtoreferat na soiskanie uchyenoy stepeni doktora fiziko-matematicheskikh nauk* (Interatomic interaction and distribution of interstitial atoms in iron-nitrogenous and iron-carbon alloys. Dr. phys. and math. sci. synopsis of diss.). Kiev: IMF NAN Ukrainy im. G.V. Kurdyumova, 1997. 55 p. (in Russ.).
16. Gavrilyuk V.G. *Raspredelenie ugleroda v stali* (Carbon distribution in steel). Kiev: Naukova Dumka. 1987. p. 208. (in Russ.).
17. Oda K., Fujimura H., Ino H. Local interactions in carbon-carbon and carbon-M (M: Al, Mn, Ni) atomic pairs in FCC γ -iron. *J. Phys.: Condens. Matter*. 1994. Vol. 6, no. 3. p. 679. doi:10.1088/0953-8984/6/3/008.
18. Blanter M.S. Interaction of interstitial carbon atoms in austenite. *Acta Metallurgica*. 1999. Vol. 41. pp. 7–8.
19. Mogutnov B.M., Tomilin N.A., Shvartsman L.A. *Termodinamika zhelezo-uglerodistykh splavov* (Thermodynamics of iron-carbon alloys). Moscow, Metallurgiya Publ. 1972. 328 p. (in Russ.).
20. Mou Y., Aaronson H.I. The carbon-carbon interaction energy in alpha Fe-C alloys. *Acta Metallurgica*. 1989. Vol. 37, Issue 3. pp. 757–765.
21. Kozheurov V.A. *Izvestiya VUZov. Chernaya metallurgiya*. 1965. no. 2. pp. 10–16. (in Russ.).
22. Dunn W.W., McLellan R.B. The Application of Quasi-chemical Solid Solution Model to Carbon Austenite. *Metall Trans*. 1970. Vol. 1, no. 5. pp. 1263–1265.
23. McLellan R.B. The C-C interaction energy in iron-carbon solid solutions. *Acta Metallurgica*. 1987. Vol. 35, no. 8. pp. 2151–2156.
24. Timoshevskii A.N., Yablonovskii S.O. Ab-initio modeling of the short range order in Fe-N and Fe-C austenitic alloys. *Functional Materials*. 2007. Vol. 99, no. 4. pp. 517–522.
25. Medvedeva N.I., Park M.S., Aken D.C.V., Medvedeva J.E. First-principles study of Mn, Al and C distribution and their effect on stacking fault energies in fcc Fe. *Journal of Alloys and Compounds*. 2014. Vol. 582. pp. 475–482.
26. Ridnyi Ya.M., Mirzoev A.A., Mirzaev D.A. Raschjot iz pervyh principov jenergij vzaimodejstvija mezhdu atomami ugleroda v antiferromagnitnom dvuhslojnom GCK-zheleze (Ab-initio calculation of interaction energies between carbon atoms in a antiferromagnetic double-layer FCC-iron). *Bulletin of South Ural State University. Series of "Mathematics. Mechanics. Physics"*. 2014. Vol. 6, no. 4. pp. 53–58. (in Russ.).
27. Schwarz K., Blaha P., Madsen G.K.H. Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material science. *Computer Physics Communications*. 2002. Vol. 147. pp. 71–76.
28. Cottenier S. Density Functional Theory and the family of (L)APW-methods: a step-by-step introduction. 2004. Available at: [http://www.wien2k.at/reg_user/textbooks/DFT_and_LAPW-2_cottenier.pdf].
29. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations. *Physical Review B*. 1976. Vol. 13, no. 12. pp. 5188–5192.
30. Ridnyi Ya.M., Mirzoev A.A., Mirzaev D.A. Ab-initio modelirovanie vliyaniya blizhnego okruzeniya primesey ugleroda na energiyu ikh rastvoreniya v GTsK-zheleze (Ab-initio simulation of influence of short-range ordering carbon impurities on the energy of their dissolution in the FCC-iron). *Bulletin of South Ural State University. Series of "Mathematics. Mechanics. Physics"*. 2013. Vol. 5, no. 2. pp. 108–116. (in Russ.).
31. Onink M., Brakman C.M., Tichelaar F.D., Mittemeijer E.J., Van der Zwaag S., Root J.H., Konyer N.B. The lattice parameters of austenite and ferrite in Fe-C as functions of carbon concentration and temperature. *Scripta Metallurgica Et Materialia*. 1993. Vol. 29, no. 8. pp. 1011–1016.
32. Deyanov R.Z., Eremin N.N., Urusov V.S. ODSS (Ordered-Disordered-Solid-Solution) Ver.1.–binary. Programma rascheta neuporyadochennykh sverkhyaček dlya modelirovaniya tverdykh rastvorov zameshcheniya (Calculation of unordered supercells for simulation of substitution solid solution). Moscow, 2006–2007. [<http://cryst.geol.msu.ru/odss/binar.pdf>].
33. Ridnyi Ya.M., Mirzoev A.A., Mirzaev D.A. Ab-initio modelirovanie energii rastvoreniya atoma ugleroda v paramagnitnom GTsK-zheleze (Ab-initio simulation of dissolution energy of carbon atom in the paramagnetic state of FCC-iron). *Bulletin of South Ural State University. Series of "Mathematics. Mechanics. Physics"*. 2014. Vol. 6, no. 3. pp. 86–91. (in Russ.).

Received 7 March 2015

ЭНЕРГОЁМКОСТЬ МЕХАНИЧЕСКОГО ДИСПЕРГИРОВАНИЯ

*Н.М. Соколова*¹

Измерено повышение температуры медного образца при трении с малой скоростью по абразиву. Установлено наступление теплового равновесия. Найдены: работа, совершенная против сил трения, и полученная образцом за то же самое время теплота. Обе величины имеют один порядок. Удельные их значения близки к энергии сублимации. Они сопоставлены с последней для шестнадцати исследованных металлов. Приведен возможный механизм, оправдывающий высокие энергетические затраты при диспергировании.

Ключевые слова: трение; абразив; удельная работа; температура; теплота; диспергирование; деформация; энергия сублимации.

Использование описанной в [1] методики истирания образца абразивом позволяет с достаточной и стабильной точностью определять работу по превращению единицы массы образца в порошок. Эта величина (удельная энергия диспергирования) определена для шестнадцати чистых металлов [2] и имеет для каждого из них своё значение. Она меняется от 11,2 МДж/кг и 5,90 МДж/кг для титана и кремния до десятых долей этих же единиц для кадмия и свинца – 0,656 и 0,245. Все прочностные (механические) свойства титана и кремния существенно выше, чем у остальных металлов, поэтому естественно, что для превращения их в порошок требуется в десятки раз большая энергия.

Вместе с тем, порядок обсуждаемой величины представляется неоправданно большим: такая энергия тратится при сублимации, т.е. при разделении вещества на отдельные атомы [3]. Представляется необходимым уточнить некоторые детали проведенных экспериментов.

Большое значение удельной работы диспергирования a может быть скрыто в самом определении этой величины. За неё мы, следуя [4], приняли отношение работы против сил трения A_{mp} к массе вещества, превращённого в порошок. Но помимо образования порошка эта работа затрачивается ещё на деформацию вещества под той поверхностью, от которой оторвались частицы. Учитывать эту работу тем более необходимо, что энергию образования мелкодисперсной фазы из монолита (речь идёт о получении частиц порядка 100–60 мкм) определяет не процесс образования новых поверхностей, а предшествующая ему деформация [5].

Деформированный в процессе трения слой может иметь массу, которая существенно больше массы образовавшегося порошка. Учёт её может заметно изменить удельную работу в сторону уменьшения.

Убедимся в этом, сравнив два определения обсуждаемой величины:

$$a = \frac{A_{mp}}{\Delta m_1} \quad \text{и} \quad a = \frac{A_{mp}}{\Delta m_1 + \Delta m_2}, \quad (1)$$

где Δm_1 – масса образовавшегося порошка; Δm_2 – масса деформированного слоя.

Оценить массу деформированного слоя Δm_2 можно по его толщине под поверхностью трения и площади образца. В [6] глубина проникновения деформации при трении медного образца по абразиву была найдена по уширению максимумов рентгенограмм, снятых с поэтапно стравливаемой поверхности трения. Каждый раз, помимо ширины максимумов, измеряли толщину образца. Стравливали поверхность очень осторожно, поэтому изменение толщины фиксировали интерферометром. Измерения повторяли до тех пор, пока ширина максимумов не совпадала с эталонной.

За эталон была принята ширина максимума рентгенограммы, снятой с чистой, не подвергнутой трению, поверхности отожжённого образца. Масса Δm_2 поэтому существенно менее энергоёмка, нежели Δm_1 : деформации в ней не доведены до разрушения и учтены даже совсем слабо деформированные слои.

¹ Соколова Наталья Марковна – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра физики, Южно-Уральский государственный университет, филиал в г. Златоусте.

E-mail: trenie-nm@yandex.ru

Значения Δt_2 оказались, вопреки ожиданиям, почти на порядок ниже, чем Δt_1 . Поэтому учёт массы деформированного слоя только несколько понизил величину a , не изменив её порядок.

Это позволило нам вести дальнейшие наблюдения и расчёты без учёта массы деформированного слоя, образующегося под поверхностью трения.

Вторая причина большого значения a может быть в том, что при трении разрушается ещё и абразив, и доля энергетических затрат на образование металлического порошка может быть существенно меньше работы трения.

В результате процессов, происходящих в зоне трения, т.е. в двух трущихся телах, выделяется тепло. В него превращается порядка 96–97 % пошедшей на трение энергии [7]. Попробуем установить, как эта теплота распределяется между трущимися телами. Часть её, которая идёт на нагревание образца, можно было бы определить по изменению его температуры, массе образца m и теплоёмкости c , связанных между собой известным уравнением:

$$dQ = cmdT . \quad (2)$$

Но не вся получаемая образцом теплота dQ_o идёт на его нагревание. Образец ещё непрерывно охлаждается, отдавая часть получаемой теплоты окружающей среде:

$$dQ_o = dQ_n + dQ_{cp} . \quad (3)$$

Первый член уравнения найдётся по (2), если принять за dT повышение температуры в процессе трения. Для его измерения мы использовали дифференциальную термопару, один спай которой был помещён в узкое отверстие, высверленное в середине медного образца. Второй – термостатирован массивным телом, помещённым рядом с трущимся образцом, т.е. имевшим комнатную, первоначальную для образца, температуру. Показания термопары записывались автоматическим электронным потенциометром ценой деления 0,083 град/мм.

На рис. 1 приведена одна из полученных кривых. Характер найденной зависимости при не-

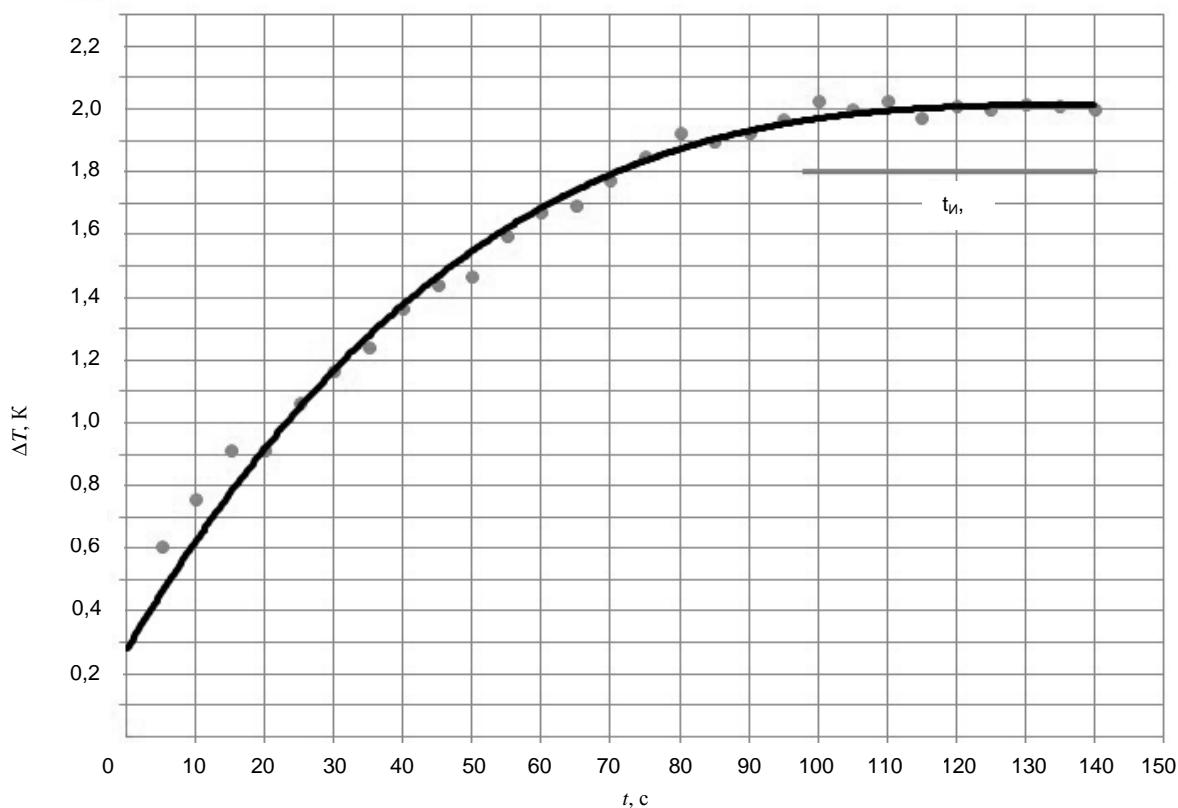


Рис. 1. Повышение температуры образца в процессе трения

однократном повторении не менялся: при используемых нами скоростях трения (0,0082 м/с) повышение температуры происходит на 1,72–2,02 градуса в течение первых 85–95 сек. Далее тре-

ние становится изотермичным: температура образца T_u сохраняется постоянной в течение всего последующего трения. Наступление теплового равновесия означает, что теплота, получаемая образцом при изотермическом трении, вся отдаётся окружающей среде:

$$dQ_o = dQ_{cp}. \quad (4)$$

Обсудим появившуюся возможность найти dQ_o по измерению теплоты, отданной среде. Она зависит не только от убыли температуры, как это следует из (2). Согласно уравнению Ньютона dQ_{cp} определяется ещё соотношением температур образца и среды и поэтому меняется по мере остывания тела:

$$dQ_{cp} = \alpha S(T - T_{cp})dt, \quad (5)$$

где α – коэффициент теплоотдачи; S – поверхность образца; T и T_{cp} – меняющаяся во времени температура образца и постоянная температура окружающей среды; t – время.

Учитывая (4), заменяя температуру образца на соответствующую изотермическому участку кривой нагрева температуру T_u и интегрируя по всему времени изотермического трения, будем иметь:

$$Q_o = \alpha S(T_u - T_{cp})t_u, \quad (6)$$

где t_u – время изотермического трения. Его легко установить по кривой нагрева образца, записанной одновременно с измерением работы против сил трения (см. рис. 1).

Коэффициент теплоотдачи определяется теми условиями, в которых находится образец, зависит от его формы и размеров. Найти α можно опытным путём. Для этого интересующее нас тело следует нагреть выше температуры окружающей среды. Процесс его охлаждения будет описываться известными нам уравнениями (2) и (5). Совместное их решение даёт возможность найти одновременно ещё и площадь образца:

$$\alpha S = cm \frac{dT}{dt} \frac{1}{(T - T_{cp})}, \quad (7)$$

где $\frac{dT}{dt}$ – скорость охлаждения образца.

Коэффициент теплоотдачи α меняется по мере понижения температуры образца T . В (6) следует подставлять значение коэффициента при температуре изотермического трения. Тогда теплота, полученная образцом в процессе трения, будет определяться помимо его теплоёмкости и массы ещё быстротой охлаждения и временем изотермического трения:

$$Q_o = cm \frac{dT}{dt} t_u. \quad (8)$$

Быстроту охлаждения можно найти по углу наклона касательной к снятой на опыте кривой зависимости температуры нагретого образца от времени. Для её получения нагретый образец ставили на абразивную ленту в тот зажим, в котором он ранее тёрся. Лента теперь не двигалась, чтобы образец только охлаждался. Естественно, что при этом охлаждение образца будет происходить несколько медленнее, чем тогда, когда лента движется. Значит, значение производной, а в итоге и конечный результат, будут занижены.

Уменьшение температуры образца записывалось с помощью термопары и потенциометра, которыми мы ранее определяли повышение температуры при трении. Данные были занесены в компьютер и обработаны по программе MathCAD.

Одна из трёх полученных кривых представлена на рис. 2. Заметно, что крутизна её различна в разных точках. Касательная проведена в точке T_u , т.е. быстрота охлаждения определена при температуре изотермического трения. Среднее из трёх значений этой величины приведено в первой колонке табл. 1.

В следующих двух колонках приведены результаты трёх опытов по определению работы, совершенной за время изотермического трения и это время. Теплота рассчитана по (8). Отношение теплоты к работе меняется от опыта к опыту в пределах, соответствующих точности наших опытов. Среднее его значение приведено в нижней строке таблицы. Окончательный результат свидетельствует, что испытуемый металл трансформирует в тепло как минимум половину затраченной

при трении энергии. Удельное её значение столь велико, что превращённый в порошок металл мог бы обратиться в пар. Но он, перейдя в дисперсную фазу, остался в твёрдом состоянии. Более того, кристаллическая структура его при этом сохранилась, правда несколько изменён её параметр [9].

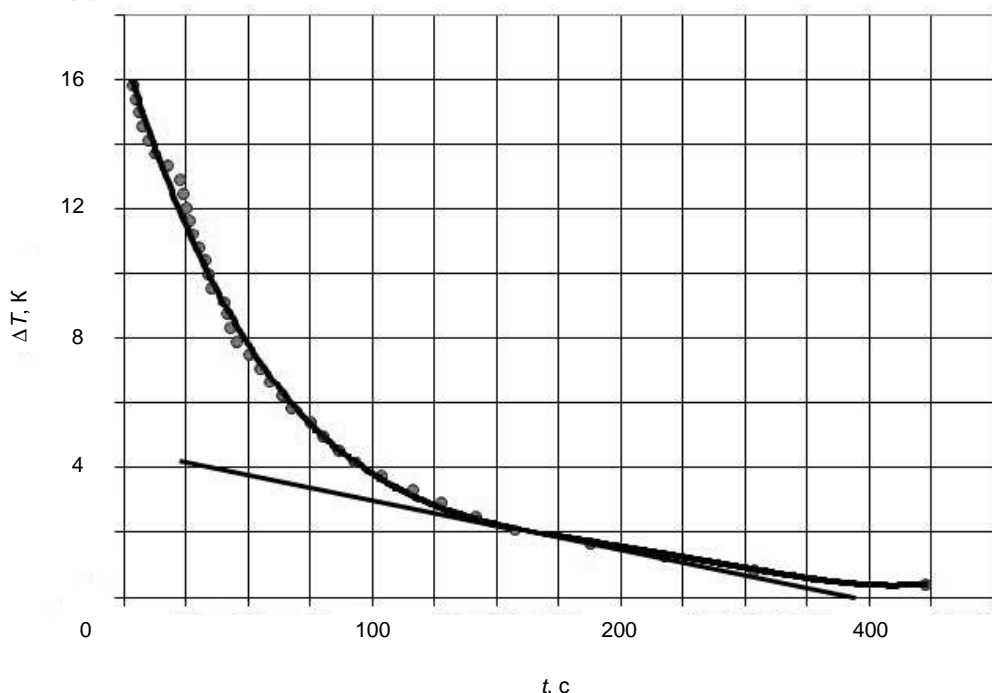


Рис. 2. Изменение температуры в процессе охлаждения образца

Таблица 1

Работа против сил трения и теплота, полученная образцом, за время изотермического трения				
$\frac{dT}{dt}$, град/с	A, Дж	t_u , с	Q_o , Дж	Q_o / A
0,0171	2,60	39,3	1,07	0,411
	3,26	45,4	1,23	0,379
	2,32	38,7	1,05	0,454
$Q_o / A = 0,415 \pm 0,028$				

Попытаемся понять этот, на первый взгляд парадоксальный, вывод. Для этого вернёмся к истокам дислокационной теории: как уже упоминалось, энергетические затраты механического измельчения металла определяют деформационные процессы [5].

Передвижение *одиночного* атома внутри твёрдого тела рассмотрено в [8] как совокупность процессов «испарения» и «конденсации». Первый процесс связан с затратой энергии, равной высоте потенциального барьера той ямы, в которой находился атом в положении своего равновесия. Второй приводит к сбросу полученной ранее энергии при переходе атома в новое положение равновесия. При движении дислокаций перемещается цепочка атомов. Не исключено, что движение каждого из них происходит по описанной выше схеме, а значит, связано с затратой энергии, сопоставимой с энергией связи атомов и последующим выделением её в виде тепла.

С этих позиций высокие энергетические затраты при механическом диспергировании представляются естественными: в образовавшихся частицах деформации чрезвычайно велики.

Естественна и проявившаяся связь удельной работы диспергирования с энергией связи атомов, взятой нами по [3, с. 116]. Значения этих энергий для всех изученных нами металлов представлены в табл. 2. Удельная работа для всех металлов найдена при одинаковых условиях – степени дисперсности частиц, давлении. Заметно, что сравниваемые величины не только имеют одинаковые порядки, но и одинаково меняются при переходе от металла к металлу и значения их при этом остаются сопоставимыми друг с другом.

Сравнение удельной энергии диспергирования металлов с энергией связи их атомов

Металл	Ti	Si	Mo	Al	Ni	W	Mg	Cu	Sb	Zn	Ag	Pt	Cd	Sn	Pb	Bi
<i>a</i> , МДж/кг	11,2	5,91	4,75	3,16	2,80	2,82	2,40	1,87	1,82	1,62	1,31	1,27	0,656	0,529	0,245	0,215
<i>E</i> , МДж/кг	9,95	15,9	6,69	11,9	7,23	4,55	6,06	5,35	2,13	2,00	2,63	2,88	0,941	0,777	0,949	0,999

Все описанные выше опыты были проведены на меди, наиболее изотропном и теплопроводном металле. Они были поставлены для того, чтобы убедиться, что в процессе абразивного трения металл действительно получает энергию, сравнимую с энергией его возгонки. Таблица 2 ещё раз подтверждает этот вывод и позволяет распространить его на другие металлы, свойства которых порой резко отличны от свойств меди.

Итак, в начале трения медного образца об абразив со скоростью 0,008 м/с его температура повышается в среднем на 1,85 градуса. Затем трение становится изотермичным. Наступившее тепловое равновесие позволяет оценить полученную образцом теплоту. Она составляет около половины работы, совершенной против сил трения. Удельное значение этой работы, трансформированной металлом в теплоту, сопоставимо с энергией сублимации. Приведены: механизм процесса, позволяющий объяснить столь большую энергоёмкость механического диспергирования и данные, свидетельствующие о связи упомянутых выше величин для шестнадцати исследованных металлов.

В заключение следует отметить, что эксперименты по определению получаемой образцом в процессе трения теплоты, их обработка выполнены студентом третьего курса факультета техники и технологии филиала А. Суворовым. Работа доложена им на семнадцатой конференции ВНКСФ [10].

Литература

1. Соколова, Н.М. Установка для определения износостойкости / Н.М. Соколова, В.Е. Серебряков // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2004. – Т. 70, № 11. – С. 52–54.
2. Соколова, Н.М. Некоторые закономерности абразивного износа / Н.М. Соколова, М.Е. Белова // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2008. – Т. 74, № 3. – С. 61–63.
3. Киттель, Ч. Введение в физику твёрдого тела / Ч. Киттель. – М.: Наука, 1978. – 791 с.
4. Кузнецов, В.Д. Физика твёрдого тела / В.Д. Кузнецов. – Томск, ТГУ, 1947. – Т. 4. – 517 с.
5. Соколова, Н.М. Физико-механические характеристики процессов измельчения вещества / Н.М. Соколова // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2008. – Т. 74, № 3. – С. 61–63.
6. Соколова, Н.М. Энергетика процессов диспергирования меди / Н.М. Соколова, А.Я. Максимов // Вопросы физики твердого тела. – Челябинск, 1972. – Вып. 3. – С. 103–108.
7. Костецкий, Б.И. Исследования энергетического баланса при внешнем трении металлов / Б.И. Костецкий, Ю.И. Линник // ДАН. – 1968. – Т. 183, № 5. – С. 1052.
8. Френкель, Я.И. Введение в теорию металлов / Я.И. Френкель. – М.: Физматгиз, 1958. – 367 с.
9. Соколова, Н.М. Измерение параметра решётки шлифованной меди / Н.М. Соколова // Вестник ЧГПУ. Серия 4. Естественные науки. – 2001. – Вып. 4. – С. 69–72.
10. Суворов А.Л. Ещё раз об энергетике механического измельчения / А.Л. Суворов, Н.М. Соколова // Материалы конференции ВНКСФ-17. – Екатеринбург, 2011. – С. 158–160.

Поступила в редакцию 24 декабря 2013 г.

ENERGY INTENSIVE MECHANICAL DISPERSION

N.M. Sokolova¹

The article presents the results of experiments made to determine the work spent on the conversion of a substance mass unit into powder in abrasive friction – dispersion specific energy of the agent. It is great and has the order of the sublimation energy for all investigated metals, that is, it is sufficient to convert the resulting powder into vapour.

The account of the deformed layer mass beneath the friction surface reduces the specific job without changing its order. During friction not only the test body, but also the abrasive is destroyed and it continuously carries away the heat produced during friction from the friction zone. Therefore, the share of energy costs in the formation of the metal powder can be substantially less than the work of friction which is used to calculate the dispersion specific energy.

The article describes experiments which enabled to evaluate the heat produced by the sample. It turns out to be about half the work of friction, and its specific value has, therefore, the order of the sublimation energy. The table is shown in which specific energy values found for sixteen pure metals are compared to the energy of their sublimation.

In transition from metal to metal both values change still remaining close to each other. The paper presents a possible mechanism of the process which enables metal to transform heat into energy comparable to the energy of its sublimation.

Keywords: friction; abrasive; specific work; temperature; heat; dispersion; deformation; sublimation energy.

References

1. Sokolova N.M., Serebryakov V.E. *Zavodskaya laboratoriya. Diagnostika materialov*. 2004. Vol. 70, no. 11. pp. 52–54. (in Russ.).
2. Sokolova N.M., Belova M.E. *Zavodskaya laboratoriya. Diagnostika materialov*. 2008. Vol. 74, no. 3. pp. 61–63. (in Russ.).
3. Kittel C. *Vvedenie v fiziku tvordogo tela* (Introduction to Solid State Physics). Moscow, Nauka Publ., 1978. 791 p. (in Russ.).
4. Kuznetsov V.D. *Fizika tvyerdogo tela* (Solid State Physics). Tomsk, TGU Publ., 1947. Vol. 4. 517 p. (in Russ.).
5. Sokolova N.M. *Zavodskaya laboratoriya. Diagnostika materialov*. 2008. Vol. 74, no. 3. pp. 61–63. (in Russ.).
6. Sokolova N.M., Maksimov A.Ya. *Voprosy fiziki tverdogo tela*. Chelyabinsk, 1972. Issue 3. pp. 103–108. (in Russ.).
7. Kostetskiy B.I., Linnik Yu.I. *DAN*. 1968. Vol. 183, no. 5. p. 1052. (in Russ.).
8. Frenkel Ya.I. *Vvedenie v teoriyu metallov* (Introduction to Theory of Metals). Moscow, Fizmatgiz Publ., 1958. 367 p.
9. Sokolova N.M. *Vestnik ChGPU. Seriya 4. Estestvennyye nauki*. 2001. Issue 4. pp. 69–72. (in Russ.).
10. Suvorov A.L., Sokolova N.M. Eshchye raz ob energetike mekhanicheskogo izmel'cheniya (Once again about energy mechanical milling). *Materialy konferenzii VNKSF-17* (Proceedings of the VNKSF-17). Ekaterinburg, 2011. pp. 158–160. (in Russ.).

Received 24 December 2013

¹ Sokolova Natalya Markovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Physics Department, Branch of South Ural State University in Zlatoust.

E-mail: trenie-nm@yandex.ru

Краткие сообщения

УДК 517.956.223

ЗАДАЧА НЕЙМАНА ДЛЯ ПОЛИГАРМОНИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ В ЕДИНИЧНОМ ШАРЕ

И.А. Гулящих¹

Получены необходимые и достаточные условия разрешимости задачи Неймана для однородного полигармонического уравнения в единичном шаре.

Ключевые слова: задача Неймана; полигармоническое уравнение; условия разрешимости.

Рассмотрим задачу Неймана для неоднородного полигармонического уравнения в единичном шаре $S = \{x \in \mathbb{R}^n : |x| < 1\}$

$$\begin{aligned} \Delta^k u(x) &= f(x), \quad x \in S; \\ \frac{\partial^j u}{\partial \nu^j} \Big|_{\partial S} &= \varphi_j(s), \quad s \in \partial S, \quad j = \overline{1, k}, \end{aligned} \quad (1)$$

где ν – единичный вектор внешней нормали к ∂S . В работе [1] была рассмотрена более общая краевая задача, содержащая многочлены высокого порядка от нормальных производных в граничных условиях, а в работе [2] приводится решение задачи Дирихле для уравнения из (1). В работе [3] была исследована задача Неймана для неоднородного бигармонического уравнения в единичном шаре, а в [4] дается решение соответствующей задачи Дирихле. В работе [5] получены условия разрешимости задачи Неймана (1), а также дается способ нахождения ее решения.

Обозначим $\Lambda u = \sum_{i=1}^n x_i u_{x_i}$.

Теорема 1. [5, теорема 8] Решение задачи Неймана (1) имеет вид

$$u(x) = \int_0^1 v(tx) \frac{dt}{t} + C, \quad (2)$$

где $v(x)$ – решение следующей задачи Дирихле

$$\begin{aligned} \Delta^k v(x) &= (\Lambda + 2k) f(x), \quad x \in S; \\ v|_{\partial S} &= \varphi_1(s), \quad \frac{\partial^j v}{\partial \nu^j} \Big|_{\partial S} = j\varphi_j(s) + \varphi_{j+1}(s), \quad s \in \partial S, \quad j = \overline{1, k-1}. \end{aligned} \quad (3)$$

Из приведенной теоремы следует, что условие разрешимости задачи Неймана (1) записывается в виде $v(0) = 0$, где $v(x)$ – решение задачи Дирихле (3). Рассмотрим частный случай задачи (1), когда $f(x) = 0$ и обозначим $f_0 = \varphi_1$, $f_j = j\varphi_j + \varphi_{j+1}$ при $j = 1, \dots, k-1$. Для нахождения значения $v(0)$ решения задачи Дирихле с функциями f_0, \dots, f_{k-1} на границе воспользуемся следующей теоремой.

Теорема 2. [6, теорема 2] Для всякой полигармонической в единичном шаре $S \subset \mathbb{R}^n$ функции $v \in C^{k-1}(\bar{S})$ справедливо равенство

$$v(0) = \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial S} \left(h_k^0 v + h_k^1 \frac{\partial v}{\partial \nu} + \dots + h_k^{k-1} \frac{\partial^{k-1} v}{\partial \nu^{k-1}} \right) ds_x, \quad (4)$$

где числа h_k^s являются коэффициентами разложения многочлена

$$H_{k-1}(\lambda) = \frac{(-1)^{k-1}}{(2k-2)!!} (\lambda-2) \dots (\lambda-2k+2) \quad (5)$$

¹ Гулящих Илья Анатольевич – аспирант, кафедра математического и функционального анализа, Южно-Уральский государственный университет.

E-mail: giarist@mail.ru

(здесь $H_0(\lambda) = 1$) по факториальным степеням $\lambda^{[s]} = \lambda(\lambda - 1) \dots (\lambda - s + 1)$

$$H_{k-1}(\lambda) = h_k^{k-1} \lambda^{[k-1]} + h_k^{k-2} \lambda^{[k-2]} + \dots + h_k^1 \lambda^{[1]} + h_k^0. \tag{6}$$

Учитывая соотношения $f_0 = \varphi_1$, $f_j = j\varphi_j + \varphi_{j+1}$, где $j = 1, \dots, k-1$, перепишем равенство (4) в виде

$$\nu(0) = \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial S} \sum_{i=0}^{k-1} h_k^i (i\varphi_i(s) + \varphi_{i+1}(s)) ds_x = \frac{1}{\omega_n} \int_{\partial S} \sum_{i=1}^k (ih_k^i + h_k^{i-1}) \varphi_i(s) ds_x,$$

где надо учитывать, что $h_k^k = 0$. Определим производную по правилу $P^{(1)}(\lambda) = P(\lambda + 1) - P(\lambda)$ [2].

Нетрудно видеть, что $(\lambda^{[k]})^{(m)} = k^{[m]} \lambda^{[k-m]}$, а поэтому из (6) находим $h_k^i = \frac{1}{i!} (H_{k-1})^{(i)}(0)$, а значит, используя формулу (5), получим

$$\begin{aligned} ih_k^i + h_k^{i-1} &= \frac{1}{(i-1)!} (H_{k-1})^{(i)}(0) + \frac{1}{(i-1)!} (H_{k-1})^{(i-1)}(0) = \frac{1}{(i-1)!} ((H_{k-1})^{(1)}(\lambda) + \\ &+ H_{k-1}(\lambda))^{(i-1)}(0) = \frac{1}{(i-1)!} (H_{k-1}(\lambda + 1))^{(i-1)}(0) = \frac{(-1)^{k-1}}{(2k-2)!!(i-1)!} (N_{k-1})^{(i-1)}(0), \end{aligned}$$

где обозначено $N_{k-1}(\lambda) = (\lambda - 1) \dots (\lambda - 2k + 3)$. Значит, условие $\nu(0) = 0$ равносильно условию

$$\int_{\partial S} \sum_{i=1}^k n_k^{i-1} \varphi_i(s) ds_x = 0,$$

где числа n_k^i являются коэффициентами разложения многочлена $N_{k-1}(\lambda)$ по факториальным степеням $\lambda^{[i]}$. Вычислим числа n_k^i .

Лемма 1. Имеет место равенство

$$(\lambda - 1) \dots (\lambda - 2k + 3) = (-1)^{k-1} \sum_{i=0}^{k-1} (-1)^i \binom{2k-i-2}{i} (2k-2i-3)!! \lambda^{[i]}, \tag{7}$$

причем при $k = 1$ многочлен слева равен 1.

Доказательство. При $k = 1$ и $k = 2$ равенство верно. Пусть оно верно при k , докажем его верность и при $k = k + 1$. Умножим (7) на $\lambda - 2k + 1$. Учитывая, что $\lambda^{[i]}(\lambda - 2k + 1) = \lambda^{[i+1]} - (2k - i - 1)\lambda^{[i]}$, справа будем иметь

$$\begin{aligned} &(-1)^{k-1} \sum_{i=0}^{k-1} (-1)^i \binom{2k-i-2}{i} (2k-2i-3)!! (\lambda^{[i+1]} - (2k-i-1)\lambda^{[i]}) = (-1)^k \sum_{i=0}^k (-1)^i \times \\ &\times \left(\binom{2k-i-1}{i-1} (2k-2i-1)!! + \binom{2k-i-2}{i} (2k-2i-3)!! (2k-i-1) \right) \lambda^{[i]}. \end{aligned}$$

Выражение в круглых скобках имеет значение

$$\begin{aligned} &\frac{(2k-2i-3)!!}{i!} (2k-i-1) \dots (2k-2i+1)(2k-2i-1)(i+(2k-2i)) = \\ &= \frac{(2k-2i-3)!!}{i!} (2k-i-1) \dots (2k-2i+1)(2k-2i-1)(2k-i) = (2k-2i-1)!! \binom{2k-i}{i}, \end{aligned}$$

а значит выражение в круглых скобках равно

$$(-1)^k \sum_{i=1}^k (-1)^i (2k-2i-1)!! \binom{2k-i}{i} \lambda^{[i]}.$$

Это означает, что формула (7) верна при $k = k + 1$. Лемма доказана.

Из леммы 1 следует, что

$$n_k^{i-1} = (-1)^{i-1} \binom{2k-i-1}{i-1} (2k-2i-1)!!,$$

а значит, условие разрешимости однородной задачи Неймана имеет вид

$$\int_{\partial S} \sum_{i=1}^k (-1)^{i-1} \binom{2k-i-1}{i-1} (2k-2i-1)!! \varphi_i(s) ds_x = 0.$$

Полученное условие согласуется с найденным в [5].

Литература

1. Карачик, В.В. Об одной задаче для полигармонического уравнения в шаре / В.В. Карачик // Сибирский математический журнал. – 1991. – Т. 32, № 5. – С. 51–58.
2. Карачик, В.В. Построение полиномиальных решений задачи Дирихле для полигармонического уравнения в шаре / В.В. Карачик // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 2014. – Т. 54, № 7. – С. 1149–1170.
3. Karachik, V.V. Solvability conditions of the Neumann boundary value problem for the biharmonic equation in the unit ball / V.V. Karachik, B.Kh. Turmetov, A. Bekaeva // International Journal of Pure and Applied Mathematics. – 2012. – Vol. 81, № 3. – P. 487–495.
4. Карачик, В.В. О полиномиальных решениях задачи Дирихле для бигармонического уравнения в шаре / В.В. Карачик, Н.А. Антропова // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2012. – Т. XV, № 2(50). – С. 86–98.
5. Карачик, В.В. Об условиях разрешимости задачи Неймана для полигармонического уравнения в единичном шаре / В.В. Карачик // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2013. – Т. XVI, № 4(56). – С. 61–74.
6. Карачик, В.В. О свойстве среднего для полигармонических функций в шаре / В.В. Карачик // Математические труды. – 2013. – Т. 16, № 2. – С. 69–88.

Поступила в редакцию 5 февраля 2015 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2015, vol. 7, no. 2, pp. 70–72*

NEUMANN PROBLEM FOR POLYHARMONIC EQUATION IN THE UNIT BALL

I.A. Gulyashchikh¹

Necessary and sufficient solvability conditions of Neumann problem for homogeneous polyharmonic equation in the unit ball are obtained.

Keywords: Neumann problem; polyharmonic equation; solvability conditions.

References

1. Karachik V.V. *Sibirskiy matematicheskiy zhurnal*. 1991. Vol. 32, no. 5. pp. 51–58. (in Russ.).
2. Karachik V.V. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki*. 2014. Vol. 54, no. 7. pp. 1149–1170. (in Russ.). DOI: 10.7868/S0044466914070072
3. Karachik V.V., Turmetov B.Kh., Bekaeva A. Solvability conditions of the Neumann boundary value problem for the biharmonic equation in the unit ball. *International Journal of Pure and Applied Mathematics*. 2012. Vol. 81, no. 3. pp. 487–495.
4. Karachik V.V., Antropova N.A. *Sibirskiy zhurnal industrial'noy matematiki*. 2012. Vol. XV, no. 2(50). pp. 86–98. (in Russ.).
5. Karachik V.V. *Sibirskiy zhurnal industrial'noy matematiki*. 2013. Vol. XVI, no. 4(56). pp. 61–74. (in Russ.).
6. Karachik V.V. On the mean value property for polyharmonic functions in the ball. *Siberian Advances in Mathematics*. 2014. Vol. 24, no. 3. pp. 169–182.

Received 5 February 2015

¹ Gulyashchikh Ilya Anatol'evich is Post-graduate Student, Mathematical and Functional Analysis Department, South Ural State University.
E-mail: giarist@mail.ru

УСТАНОВИВШЕЕСЯ ДВИЖЕНИЕ ЖИДКОСТИ СО СТЕПЕННЫМ ЗАКОНОМ ВЯЗКОСТИ МЕЖДУ ВРАЩАЮЩИМИСЯ ЦИЛИНДРАМИ

К.З. Хайрисламов¹

Рассматривается стационарное течение вязкой несжимаемой жидкости между двумя коаксиальными бесконечными цилиндрами, вращающимися с постоянными угловыми скоростями. Динамическая вязкость жидкости предполагается переменной, а именно зависящей от скоростей деформаций по степенному закону. В предположении, что жидкость не течет в радиальном и аксиальном направлениях, было получено выражение для азимутальной компоненты скорости, обобщающее известную формулу для жидкости с постоянной вязкостью.

Ключевые слова: установившееся течение; вязкая жидкость; степенной закон вязкости; неньютоновская жидкость.

Введение

При решении задач о течении вязких жидкостей предположение о постоянстве коэффициента динамической вязкости исключает из рассмотрения такие важные с практической точки зрения вещества, как масла, смазки, растворы и т. д. Такие жидкости относятся к классу так называемых неньютоновских жидкостей [1]. Некоторые из них могут менять свои вязкостные свойства при движении и находят применение, например, в гидроамортизаторах, гидравлических муфтах сцепления и др.

В работе исследуется стационарное течение степенной жидкости между вращающимися цилиндрами.

1. Постановка задачи

Рассмотрим установившееся течение вязкой несжимаемой жидкости, заключенной между двумя коаксиальными бесконечными цилиндрами, вращающимися вокруг своей оси с угловыми скоростями ω_1 и ω_2 . Радиусы цилиндров пусть будут равны R_1 и R_2 , причем $R_2 > R_1$. Выберем цилиндрические координаты (r, φ, z) с осью z по оси цилиндров. Будем считать, что траектории всех частиц среды представляют собой дуги концентрических окружностей, т.е.

$$v_r = v_z = 0, \quad v_\varphi = v_\varphi(r, \varphi) \neq 0. \quad (1)$$

Условие несжимаемости

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(rv_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$$

в этом случае принимает вид

$$\frac{\partial v_\varphi}{\partial \varphi} = 0, \quad (2)$$

поэтому v_φ является функцией только r .

Уравнения Навье–Стокса, описывающие стационарное движение вязкой несжимаемой жидкости, имеют вид [2]

$$\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} = -\nabla p + \nabla \cdot \left(\mu \left(\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T \right) \right), \quad (3)$$

где $\mathbf{v} = (v_r, v_\varphi, v_z)$ – скорость жидкости, p – давление, μ – динамический коэффициент вязкости, ∇ – оператор набла, а символ T обозначает транспонирование. С учетом условий (1), (2) уравнения (3) принимают следующий вид

¹ Хайрисламов Кирилл Зинатуллаевич – аспирант, кафедра прикладной математики, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: haigh1510@gmail.com

$$\frac{\partial p}{\partial r} = \frac{u^2}{r}, \quad \frac{\partial p}{\partial \varphi} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \mu \left(\frac{\partial u}{\partial r} - \frac{u}{r} \right) \right), \quad \frac{\partial p}{\partial z} = 0, \quad (4)$$

где $v_\varphi(r)$ заменено на $u(r)$. Будем считать, что $\mu = \mu(u)$, а на стенках цилиндров выполняется условие прилипания, т.е.

$$u(R_1) = \omega_1 R_1, \quad u(R_2) = \omega_2 R_2. \quad (5)$$

2. Решение

Из третьего уравнения в (4) видно, что $p = p(r, \varphi)$. Теперь продифференцируем первое уравнение в (4) по φ , получим

$$\frac{\partial^2 p}{\partial \varphi \partial r} = 0,$$

откуда следует, что величина $\partial p / \partial \varphi$ зависит только от φ . Т.е. во втором уравнении в (4) слева от знака равенства стоит величина, зависящая только от φ , а справа величина, от φ не зависящая. Это возможно только в том случае, если эти величины равны одной и той же константе K , т.е.

$$p = K\varphi + f(r).$$

Очевидно, что значение p одно и то же при $\varphi = 0$ и $\varphi = 2\pi$, откуда следует, что $K = 0$ и

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \mu \left(\frac{\partial u}{\partial r} - \frac{u}{r} \right) \right) = 0. \quad (6)$$

Пусть $\mu = \mu \left((2 \text{Tr} e^2)^{1/2} \right)$, где Tr – оператор следа, e – тензор скоростей деформаций, ненулевые компоненты которого равны

$$e_{r\varphi} = e_{\varphi r} = \frac{1}{2} q, \quad q = \frac{\partial u}{\partial r} - \frac{u}{r}. \quad (7)$$

Положим $\mu = \mu_0 (2\lambda^2 \text{Tr} e^2)^{(n-1)/2}$, откуда с учетом (7) $\mu = \mu_0 (\lambda |q|)^{n-1}$ (здесь параметр $\lambda > 0$ играет роль обезразмеривающего множителя, имея размерность секунд c ; т.к. величина q имеет размерность $1/c$, то в этом случае величины μ и μ_0 имеют одну размерность вязкости – Па \times с). Подставляя это выражение в (6), получаем

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \mu_0 \lambda^{n-1} |q|^{n-1} q \right) = 0. \quad (8)$$

Интегрирование (8) дает

$$r^2 \mu_0 \lambda^{n-1} |q|^{n-1} q = C, \quad C = \text{const},$$

откуда

$$r^2 \mu_0 \lambda^{n-1} |q|^n = |C|,$$

заметим, что знаки величин q и C совпадают, поэтому

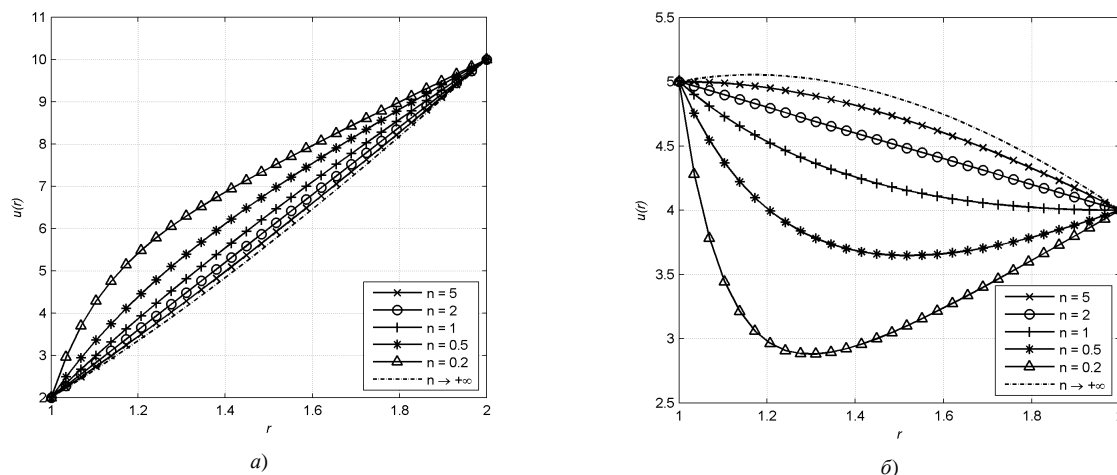
$$q = Ar^{-2/n},$$

где $A = \frac{\text{sign}(C)}{\lambda} \left(\frac{\lambda |C|}{\mu_0} \right)^{1/n}$. Далее, подставляя выражение $q = r \partial(u/r) / \partial r$, что следует из (7), получаем

$$u = Br - \frac{n}{2} Ar^{1-2/n},$$

где значения для A и B определяются из граничных условий (5). В итоге

$$u(r) = \frac{R_2^{2/n} \omega_2 - R_1^{2/n} \omega_1}{R_2^{2/n} - R_1^{2/n}} r - \frac{(R_1 R_2)^{2/n} (\omega_2 - \omega_1)}{R_2^{2/n} - R_1^{2/n}} r^{1-2/n}. \quad (9)$$



Графики скорости $u(r)$ в зависимости от значений n : а) скорость внутреннего цилиндра меньше, чем внешнего, б) скорость внутреннего цилиндра больше, чем внешнего

На рисунке построены получившиеся графики скорости (9) в зависимости от n , откуда видно, что в большей степени непостоянность коэффициента вязкости влияет на жидкости, для которых $n < 1$ (так называемые псевдопластики). Отметим, что при одинаковых скоростях цилиндров жидкость движется как целое с постоянной угловой скоростью.

Литература

1. Уилкинсон, У. Неньютоновские жидкости / У. Уилкинсон; под ред. А.В. Лыкова. – М.: Мир, 1964. – 216 с.
2. Серрин, Дж. Математические основы классической механики жидкости / Дж. Серрин; под ред. Л.В. Овсянникова. – М.: Издательство иностранной литературы, 1963. – 256 с.

Поступила в редакцию 20 января 2015 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2015, vol. 7, no. 2, pp. 73–75*

A STEADY-STATE FLOW OF A POWER-LAW FLUID BETWEEN ROTATING COAXIAL CYLINDERS

K.Z. Khayrislamov¹

The author considers steady-state flow of viscous incompressible fluid between two coaxial infinite cylinders which rotate with constant angular velocity. It is assumed that fluid viscosity is variable and depends on straining rate defined by power law. Under the assumption that the fluid doesn't flow in radial and axial directions the author obtains the expression for azimuthal velocity component which generalizes the familiar formula of the fluid with constant viscosity.

Keywords: steady-state flow; viscous fluid; power-law fluid; non-Newtonian fluid.

References

1. Uilkinson U. *Nen'yutonovskie zhidkosti* (Non-Newtonian Fluids). Moscow, Mir Publ., 1964. 216 p. (in Russ.). [Wilkinson W.L. Non-Newtonian fluids; fluid mechanics, mixing and heat transfer. Pergamon Press, New York, 1960. 138 p.]
2. Serrin Dzh. *Matematicheskie osnovy klassicheskoy mekhaniki zhidkosti* (Mathematical fundamentals of classical mechanics of fluids). Moscow, Izdatel'stvo inostrannoy literatury Publ., 1963. 256 p. (in Russ.). [Serrin J. Mathematical principles of classical fluid mechanics. Springer-Verlag, Berlin-Göttingen-Heidelberg, 1959. 148 p.]

Received 20 January 2015

¹ Khayrislamov Kirill Zinatullaevich is Post-Graduate student, Applied Mathematics Department, South Ural State University.
E-mail: haigh1510@gmail.com

СВЕДЕНИЯ О ЖУРНАЛЕ

Серия основана в 2009 году.

Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-57362 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», Е29211 в Интернет-каталоге агентства «Книга-Сервис».

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 (150–250 слов), 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, расширенная аннотация (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

9. Полную версию правил подготовки рукописей и пример оформления можно загрузить с сайта журнала: см. www.vestnik.susu.ac.ru/mmph.

10. Журнал распространяется по подписке. Электронная версия: см. www.elibrary.ru, <http://vestnik.yourgpu.rf/mmph>.

11. Плата с аспирантов за публикацию не взимается.

Редактор А.Ю. Федерякин

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 23.03.2015. Формат 60×84 1/8. Печать цифровая.

Усл. печ. л. 8,83. Тираж 500 экз. Заказ 41/121.

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ. 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.