

ВЕСТИК

ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА

№ 2 (42)
2005

СЕРИЯ

«МАТЕМАТИКА,
ФИЗИКА, ХИМИЯ»

Выпуск 5

Редакционная коллегия

д.т.н., профессор Михайлов Г.Г. (*отв. редактор*),
к.ф.-м.н., доцент Е.В. Голубев (*отв. секретарь*).

д.ф.-м.н., профессор Бескачко В.П., д.т.н., профессор Гуревич С.Ю.,
д.ф.-м.н., профессор Менихес Л.Д., к.ф.-м.н., профессор Заляпин В.И.,
д.х.н., профессор Лыкасов А.А., д.х.н., профессор Рябухин А.Г.

СОДЕРЖАНИЕ

Математика

АДУКОВ В.М. Об асимптотическом поведении знаменателей аппроксимаций Паде для предпоследней промежуточной строки	3
АДУКОВ В.М., ИБРЯЕВА О.Л. Об единственности и устойчивости решения задачи линейной аппроксимации Паде–Чебышева	10
ДИЛЬМАН В.Л. О некоторых математических моделях напряженного состояния пластической среды при осесимметричной деформации	29
ЕРМАКОВ С.В., ЗАЛЯПИН В.И. Интегральные уравнения обратной задачи прикладной биофизики. Вычислительный эксперимент	26
МАКАРОВ А.С. Об уравнении соболевского типа с полиномиально ограниченной относительной резольвентой	35
ХАРИТОНОВА Е.В. Численный анализ обратной задачи теории измерений	42
ЧЕГОДАЕВА Е.А. Метод симплектического интегрирования уравнений движения малых тел Солнечной системы	49
ЭВНИН А.Ю. Период суммы двух периодических функций	56

Физика

АБДРАФИКОВ С.Н., МУРЗИН В.Л., ПОСТАУТОВ К.В., СЛИВА О.К., ТАРАНЕНКО П.А. Измерение переменной массы твердого тела в недоступном объеме	62
АБЫЗОВ А.А., САДАКОВ О.С. О влиянии первого инварианта напряжений на малоцикловую усталость	69
АБЫЗОВ А.А., САДАКОВ О.С. Применение структурной модели для оценки усталости при многопараметрическом случайному воздействии	73
АЛЕКСАНДРОВ А.Н., ГОЛУБЕВ Е.В. Нагрев бесконечной металлической пластины импульсным лазерным излучением	80
БИРЮКОВ Е.Е. К вопросу о существовании десятой планеты	86
ВОРОНЦОВ А.Г., БЕЛАЩЕНКО Д.К. Температурные изменения структуры жидкого железа	96
ВЯТКИН Г.П., ЕЛЮХИНА И.В. Моделирование движения вязкопластичной среды в цилиндре, совершающем затухающие крутильные колебания	100
ГЕРЕНШТЕЙН А.В., ТОЛИПОВ Х.Б. Об одном способе определения скорости волны Рэлея	107
ЕЛЮХИНА И.В. К измерению вязкопластичных свойств раствора глицерина капиллярным методом	110
ЕЛЮХИНА И.В. Обсуждение возможностей маятникового вискозиметра для исследования неньютоновских свойств	112
САДАКОВ О.С. Символическое «деление» векторов в механике сплошной среды ...	115
СЕРДЕГА Ю.П. Немалые колебания и круговращения маятника	119
ТОЛИПОВ Х.Б. О структуре акустического поля, возникающего при дифракции рэлеевской волны на ограничивающей плоскости, расположенной под углом к поверхности	122
ТОЛИПОВ Х.Б., ГУРЕВИЧ С.Ю. Волноводные свойства клиновидной пластины	129
ШУЛЬГИНОВ А.А., ЗАБЕЙВОРОТА Н.С. Инфразвуковые флуктуации проводимости металлических пленок Со и Ag	133

Химия

ВАРЛАМОВА Т.В., ЛЫСОВА Г.А., БОРОВИК С.И. Использование антиоксидантов в составе магнезиальных углеродсодержащих огнеупорных материалов	137
ГУСЕВ А.В., ПРИВАЛОВА Т.П., ЧУДАКОВ А.Е. Моделирование поверхностной сегрегации и десорбции при помощи метода Монте-Карло: проблемы и подходы к решению	146
КОВАЛЕВ И.Н., ВИКТОРОВ В.В., БАЙТИНГЕР Е.М. Структура остаточных соединений графита, полученных гидролизом бисульфата графита	149
РЯБУХИН А.Г., СТЕННИКОВ М.А. Расчет температурной зависимости теплоемкостей собственных шпинелей Mg_3O_4	156
РЯБУХИН А.Г., СТЕННИКОВ М.А. Температурная зависимость молярной теплоемкости оксидов хрома	159

Математика

УДК 517.53

ОБ АСИМПТОТИЧЕСКОМ ПОВЕДЕНИИ ЗНАМЕНАТЕЛЕЙ АППРОКСИМАЦИЙ ПАДЕ ДЛЯ ПРЕДПОСЛЕДНЕЙ ПРОМЕЖУТОЧНОЙ СТРОКИ

В.М. Адуков

Пусть $a(z)$ – мероморфная функция, имеющая в круге $|z| < R$ точно λ полюсов. В работе изучается асимптотическое поведение знаменателей аппроксимаций Паде для $(\lambda - 2)$ -й строки (предпоследней промежуточной строки) таблицы Паде функции $a(z)$ в случае одного доминирующего полюса. Используется метод, разработанный ранее автором для последней промежуточной строки.

1. Введение

Пусть $a(z)$ – функция, мероморфная в круге $D_R = \{z \in \mathbb{C} \mid |z| < R\}$ и аналитическая в начале координат. Пусть z_1, \dots, z_ℓ ее различные полюсы кратностей s_1, \dots, s_ℓ , соответственно, и $\lambda = s_1 + \dots + s_\ell$ – число ее полюсов в D_R . Пусть $\rho \equiv |z_1| = \dots = |z_\mu| > |z_{\mu+1}| \geq \dots \geq |z_\ell|$.

Если $m = \sum_{j=1}^{\ell} s_j$ или $m = \sum_{j=\mu+1}^{\ell} s_j$, то по теореме Монтессу (см., например, [2]) аппроксимации Паде $\pi_{n,m}(z)$ сходятся при $n \rightarrow \infty$ к $a(z)$ равномерно на компактных подмножествах области $D_R \setminus \{z_1, \dots, z_\ell\}$ или $D_\rho \setminus \{z_{\mu+1}, \dots, z_\ell\}$, соответственно. Стока таблицы Паде с номером m , удовлетворяющим неравенствам $\sum_{j=\mu+1}^{\ell} s_j < m < \sum_{j=1}^{\ell} s_j$, называется *промежуточной строкой*. Достаточные условия сходимости всей промежуточной строки были получены в [3].

Для строки с номером $m = \lambda - 1 = \sum_{j=1}^{\ell} s_j - 1$ (*последняя промежуточная строка*) известно асимптотическое поведение знаменателей $Q_{n,\lambda-1}(z)$ аппроксимаций Паде $\pi_{n,\lambda-1}(z)$ и найдены все предельные точки полюсов $\pi_{n,\lambda-1}(z)$ [1]. Оказалось, что асимптотика $Q_{n,\lambda-1}(z)$ в основном определяется арифметической природой *доминирующих полюсов* $a(z)$, то есть полюсов, имеющих максимальный модуль и максимальную кратность. Знание предельных точек полюсов позволяет найти множество, внутри которого равномерно сходится вся последняя промежуточная строка. Тем самым для данной строки построена полная теория равномерной сходимости.

Метод работы [1] основан на соображениях устойчивости. Он позволяет свести изучение сходимости строки таблицы Паде мероморфной функции $a(z)$ к такой же задаче, но для более простой рациональной функции (рациональной части $a(z)$).

Соображения устойчивости без каких-либо ограничений на функцию $a(z)$ можно применять только к строкам с номерами $m = \lambda$, $m = \lambda - 1$. Однако для некоторых классов функций метод может оказаться эффективным и для других промежуточных строк. Цель работы – продемонстрировать это на примере предпоследней промежуточной строки для мероморфной функции с одним доминирующим полюсом.

2. Критерий устойчивости

В работе [1] показано, что в задаче аппроксимаций Паде естественно возникают понятия индексов и существенных многочленов, введенные в [4]. (Определения и обозначения из этих работ

мы часто будем использовать без напоминания.) Там показано, что знаменатели аппроксимаций Паде – это первые существенные многочлены соответствующей последовательности, а соображения устойчивости применимы, когда индексы этой последовательности устойчивы.

Поэтому мы начнем с установления критерия устойчивости и нахождения индексов и существенных многочленов последовательности $r_{n-m+1}^{n+m} = \{r_{n-m+1}, r_{n-m+2}, \dots, r_{n+m}\}$, составленной из коэффициентов Тейлора правильной рациональной и аналитической в $z=0$ функции $r(z) = \frac{N(z)}{D(z)}$, $\deg D(z) = \lambda$, при $m = \lambda - 2$. Именно эта последовательность необходима для определения знаменателя аппроксимации Паде типа (n, m) (см. [1]).

Нам потребуются некоторые результаты по строке с номером $m = \lambda - 1$ из статьи [1]. Для рациональной функции $r(z)$ знаменателем $Q_{n,\lambda-1}(z)$ аппроксимации Паде типа $(n, \lambda - 1)$ является многочлен $V_{n+\lambda}^{(1)}(z)$, который находится из следующего рекуррентного соотношения $V_{k+1}^{(1)}(z) = zV_k^{(1)} - v_k^{(1)}D(z)$, $k \geq 0$, где $v_k^{(1)}$ – коэффициент при старшей степени $z^{\lambda-1}$ многочлена $V_k^{(1)}(z)$, а $V_0^{(1)}(z)$ единственным образом находится из решения уравнения Безу $U_0^{(1)}(z)D(z) + V_0^{(1)}(z)N(z) = 1$, при условии, что $\deg V_0^{(1)}(z) < \lambda$. Оказывается, что многочлены $V_k^{(1)}(z)$ удовлетворяют разностному уравнению

$$V_{k+\lambda}^{(1)}(z) + d_{\lambda-1}V_{k+\lambda-1}^{(1)}(z) + \dots + d_0V_k^{(1)}(z) = 0, \quad k \geq 0, \quad (1)$$

где $D(z) = z^\lambda + d_{\lambda-1}z^{\lambda-1} + \dots + d_0$. Отсюда получается явная формула для $V_k^{(1)}(z)$:

$$V_k^{(1)}(z) = \sum_{j=1}^{\lambda} \sum_{i=1}^j d_{\lambda-i+1} v_{k+j-i}^{(1)} z^{\lambda-j}, \quad k \geq 0. \quad (2)$$

Отличие случая $m = \lambda - 2$ от предыдущего в том, что теперь не для любой рациональной дроби $r(z)$ индексы последовательности будут устойчивыми. Например, если $r(z) = \frac{z}{z^4 - 1}$, то $r_n = 1$ при $n = 4k + 1$ и $r_n = 0$ в остальных случаях. В круге $|z| < R$, $R > 1$, функция $r(z)$ имеет $\lambda = 4$ полюсов. Легко проверить, что при $m = \lambda - 2$ последовательность r_{n-m+1}^{n+m} имеет устойчивые индексы только при $n = 4k, 4k + 1$. Устойчивость же индексов является необходимым условием применимости нашего метода. Поэтому, прежде всего мы выясним условия устойчивости.

Теорема 1. *Последовательность $r_{n-\lambda+3}^{n+\lambda-2}$, ассоциированная с аппроксимацией Паде типа $(n, \lambda - 2)$, имеет устойчивые индексы $n, n + 1$ тогда и только тогда, когда хотя бы одно из чисел $v_{n+\lambda-1}^{(1)}, v_{n+\lambda}^{(1)}$ отлично от нуля. Если при выполнении этого условия определить многочлен $V_k^{(2)}(z) = v_k^{(1)}V_{k-1}^{(1)}(z) - v_{k-1}^{(1)}V_k^{(1)}(z)$ формальной степени $\lambda - 2$, то существенные многочлены $Q_1(z), Q_2(z)$ последовательности $r_{n-\lambda+3}^{n+\lambda-2}$ находятся следующим образом:*

- 1) $Q_1(z) = V_{n+\lambda}^{(2)}(z), Q_2(z) = V_{n+\lambda-1}^{(1)}(z)$, или $Q_1(z) = V_{n+\lambda}^{(2)}(z), Q_2(z) = V_{n+\lambda}^{(1)}(z)$, или $Q_1(z) = V_{n+\lambda}^{(2)}(z), Q_2(z) = V_{n+\lambda+1}^{(1)}(z)$ при $v_{n+\lambda-1}^{(1)} \neq 0, v_{n+\lambda}^{(1)} \neq 0$;
- 2) $Q_1(z) = V_{n+\lambda}^{(2)}(z), Q_2(z) = V_{n+\lambda+1}^{(1)}(z)$ при $v_{n+\lambda-1}^{(1)} = 0, v_{n+\lambda}^{(1)} \neq 0$;
- 3) $Q_1(z) = V_{n+\lambda}^{(2)}(z), Q_2(z) = V_{n+\lambda-1}^{(1)}(z)$ при $v_{n+\lambda-1}^{(1)} \neq 0, v_{n+\lambda}^{(1)} = 0$.

Тестовое число σ_0 для пары многочленов $V_{n+\lambda}^{(2)}(z), V_{n+\lambda-1}^{(1)}(z)$ совпадает с $\left(v_{n+\lambda-1}^{(1)}\right)^2$, для пары $V_{n+\lambda}^{(2)}(z), V_{n+\lambda}^{(1)}(z) - c v_{n+\lambda-1}^{(1)} v_{n+\lambda}^{(1)}$, а для $V_{n+\lambda}^{(2)}(z), V_{n+\lambda+1}^{(1)}(z) - c \left(v_{n+\lambda-1}^{(1)}\right)^2$.

Доказательство. Необходимость. Покажем, что, если $v_{n+\lambda-1}^{(1)} = 0, v_{n+\lambda}^{(1)} = 0$, то индексы $r_{n-\lambda+3}^{n+\lambda-2}$ неустойчивы. Поскольку $v_{n+\lambda-1}^{(1)} = 0$, то $V_{n+\lambda}^{(1)}(z) = zV_{n+\lambda-1}^{(1)}(z)$. Поэтому условие $v_{n+\lambda}^{(1)} = 0$

означает, что степень $V_{n+\lambda-1}^{(1)}(z)$ не превосходит $\lambda-3$ и многочлен $V_{n+\lambda}^{(1)}(z)$ имеет нулевой свободный член и нулевой формальный старший коэффициент, то есть $Q_1(z) = V_{n+\lambda}^{(1)}(z) = \beta_1 z + \dots + \beta_{\lambda-2} z^{\lambda-2}$. По теореме 4.1 из [1] $V_{n+\lambda}^{(1)}(z)$ принадлежит $N_{n+1}(r_{n-\lambda+2}^{n+\lambda-1})$. Итак, ненулевой вектор $(\beta_1, \dots, \beta_{\lambda-2})$ принадлежит пространству $\ker T_n(r_{n-\lambda+3}^{n+\lambda-2})$. Это означает, что индексы последовательности $r_{n-\lambda+3}^{n+\lambda-2}$ удовлетворяют неравенствам $\mu_1 \leq n-1$, $\mu_2 \geq n+2$, то есть являются неустойчивыми.

Достаточность. Пусть среди чисел $v_{n+\lambda-1}^{(1)}$, $v_{n+\lambda}^{(1)}$ есть не равные нулю. Определим многочлен $V_k^{(2)}(z) = v_k^{(1)}V_{k-1}^{(1)}(z) - v_{k-1}^{(1)}V_k^{(1)}(z)$ формальной степени $\lambda-2$.

Учитывая, что $V_{n+\lambda}^{(1)}(z)$ принадлежит $N_{n+1}(r_{n-\lambda+2}^{n+\lambda-1})$, а $V_{n+\lambda-1}^{(1)}(z) \in N_n(r_{n-\lambda+1}^{n+\lambda-2})$, получаем $\sigma\{z^{-i}V_{n+\lambda}^{(2)}(z)\} = v_{n+\lambda}^{(1)}\sigma\{z^{-i}V_{n+\lambda-1}^{(1)}(z)\} - v_{n+\lambda-1}^{(1)}\sigma\{z^{-i}V_{n+\lambda}^{(1)}(z)\} = 0$ для $i = n+1, \dots, n+\lambda-2$. Эти условия означают, что $V_{n+\lambda}^{(2)}(z) \in N_n(r_{n-\lambda+3}^{n+\lambda-2})$. Также нетрудно проверить, что многочлены $V_{n+\lambda-1}^{(1)}(z)$, $V_{n+\lambda}^{(1)}(z)$, $V_{n+\lambda+1}^{(1)}(z)$ всегда принадлежат $N_{n+2}(r_{n-\lambda+3}^{n+\lambda-2})$. Положим теперь $\kappa_1 = n$, $\kappa_2 = n+1$ и вычислим тестовое число σ_0 для многочленов $V_{n+\lambda}^{(2)}(z)$, $V_{n+\lambda-1}^{(1)}(z)$. Для этого нам потребуется старший коэффициент $v_k^{(2)}$ многочлена $V_k^{(2)}(z)$. Из рекуррентной формулы для $V_k^{(1)}(z)$ легко получить соотношение

$$zV_k^{(2)}(z) = v_k^{(1)}V_k^{(1)}(z) - v_{k-1}^{(1)}V_{k+1}^{(1)}(z), \quad (3)$$

из которого следует, что $v_k^{(2)} = (v_k^{(1)})^2 - v_{k-1}^{(1)}v_{k+1}^{(1)}$.

Учитывая теперь соотношение (3), мы получаем

$$\begin{aligned} \sigma_0 &= \sigma\left\{z^{-n}v_{n+\lambda-1}^{(1)}V_{n+\lambda}^{(2)}(z) - z^{-n-1}v_{n+\lambda}^{(2)}V_{n+\lambda-1}^{(1)}(z)\right\} = \\ &= \sigma\left\{z^{-n-1}\left[\left(v_{n+\lambda-1}^{(1)}v_{n+\lambda+1}^{(1)} - (v_{n+\lambda}^{(1)})^2\right)V_{n+\lambda-1}^{(1)}(z) + v_{n+\lambda-1}^{(1)}v_{n+\lambda}^{(1)}V_{n+\lambda}^{(1)}(z) - (v_{n+\lambda-1}^{(1)})^2V_{n+\lambda+1}^{(1)}(z)\right]\right\}. \end{aligned}$$

Легко видеть, что $\sigma\{z^{-n-1}V_{n+\lambda-1}^{(1)}(z)\} = 0$, $\sigma\{z^{-n-1}V_{n+\lambda+1}^{(1)}(z)\} = -1$. Таким образом, для многочленов $V_{n+\lambda}^{(2)}(z)$, $V_{n+\lambda-1}^{(1)}(z)$ имеем $\sigma_0 = (v_{n+\lambda-1}^{(1)})^2$.

Аналогичным образом показывается, что тестовое число σ_0 для многочленов $V_{n+\lambda}^{(2)}(z)$, $V_{n+\lambda}^{(1)}(z)$ совпадает с $v_{n+\lambda-1}^{(1)}v_{n+\lambda}^{(1)}$, а для $V_{n+\lambda}^{(2)}(z)$, $V_{n+\lambda+1}^{(1)}(z)$ с $(v_{n+\lambda-1}^{(1)})^2$.

Для завершения доказательства осталось применить критерий существенности из [4] в скалярном случае. ▲

Ниже мы покажем, что условия теоремы выполняются, если функция $r(z)$ имеет один доминирующий полюс.

3. Асимптотика знаменателей аппроксимаций Паде

Мы начнем с асимптотики знаменателей аппроксимаций Паде для рациональной части $r(z)$ мероморфной функции $a(z)$. Затем применение подготовительной теоремы 7.1 из [1] позволит получить асимптотику и в мероморфном случае. Как правило, мы будем ограничиваться изложением только схемы доказательств, так как рассуждения такие же, как и в работе [1].

Из теоремы 1 и формулы (2) следует, что знаменатель $V_{n+\lambda}^{(2)}(z)$ аппроксимации Паде типа $(n, \lambda - 2)$ выражается через коэффициент $v_k^{(1)}$. Этот коэффициент, очевидно, удовлетворяет разностному уравнению (1). По теореме о структуре общего решения линейного разностного уравнения с постоянными коэффициентами имеем

$$v_k^{(1)} = p_1(k)z_1^k + \dots + p_\ell(k)z_\ell^k, \quad k \geq 0. \quad (4)$$

Здесь $p_j(k) = C_j^0 + C_j^1 k + \dots + C_j k^{s_j-1}$ – многочлен от k степени не выше $s_j - 1$ и старший коэффициент C_j находится по формуле:

$$C_j = \frac{1}{(s_j - 1)! z_j^{s_j-1} D_j^2(z_j) A_j},$$

где $D_j(z) = \frac{D(z)}{(z - z_j)^{s_j}}$, $1 \leq j \leq \ell$, A_j – коэффициент при $(z - z_j)^{-s_j}$ в разложении $a(z)$ в ряд Лорана в окрестности полюса $z = z_j$ (см.[1]).

Таким образом, для изучения асимптотики $V_k^{(2)}(z)$ при $k \rightarrow \infty$ нам нужно исследовать асимптотику $v_k^{(1)}$. Пусть $|z_1| = \dots = |z_\mu| > |z_{\mu+1}| \geq \dots \geq |z_\ell|$. Упорядочим полюсы максимального модуля z_1, \dots, z_μ так, чтобы для их кратностей выполнялось $s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_\mu$. Пусть $s_1 = \dots = s_{\nu_1} > s_{\nu_1+1} = \dots = s_{\nu_1+\nu_2} > \dots$. Полюсы z_1, \dots, z_{ν_1} будем называть *доминирующими полюсами первого уровня*, $z_{\nu_1+1}, \dots, z_{\nu_1+\nu_2}$ – *второго* и т.д. В этой работе мы будем рассматривать только случай, когда $\nu_1 = 1$. Тогда из формулы (4) следует, что для коэффициентов $v_k^{(1)}$ справедлива следующая асимптотика

$$v_k^{(1)} = z_1^k k^{s_1-1} [C_1 + o(1)], \quad k \rightarrow \infty,$$

и, следовательно, $v_k^{(1)} \neq 0$ для всех достаточно больших k .

По теореме 1 это означает, что для всех достаточно больших n последовательность r_{n-m+1}^{n+m} при $m = \lambda - 2$ имеет устойчивые индексы $\mu_1 = n$, $\mu_2 = n+1$ и существенные многочлены $Q_1(z) = V_{n+\lambda}^{(2)}(z) = v_{n+\lambda} V_{n+\lambda-1}^{(1)}(z) - v_{n+\lambda-1} V_{n+\lambda}^{(1)}(z)$ и $Q_2(z) = V_{n+\lambda-1}^{(1)}(z)$. Учитывая явную формулу (2) для $V_k^{(1)}(z)$, получаем

$$V_k^{(2)}(z) = \sum_{j=1}^{\lambda-1} \left(\sum_{i=1}^j d_{\lambda-i+1} \Delta_{k,j-i} \right) z^{\lambda-j-1}. \quad (5)$$

$$\text{Здесь } \Delta_{k,m} = \begin{vmatrix} v_k^{(1)} & v_{k-1}^{(1)} \\ v_{k+m+1}^{(1)} & v_{k+m}^{(1)} \end{vmatrix}.$$

Итак, для получения асимптотики знаменателя $V_{n+\lambda}^{(2)}(z)$ требуется асимптотика определителей $\Delta_{k,m}$. Принимая во внимание формулу (4) для $v_k^{(1)}$, нетрудно прийти к следующему результату:

$$\begin{aligned} \Delta_{k,m} = & k^{2s_1-4} z_1^{2k+m} \left[(m+1)(s_1-1)C_1^2 + o(1) \right] + \\ & + k^{s_1+s_2-2} z_1^{2k+m} \left[\sum_{i=2}^{v_2+1} \left(\frac{z_i}{z_1} \right)^{k-1} \frac{z_i - z_1}{z_1} C_i C_1 \left(1 - \left(\frac{z_i}{z_1} \right)^{m+1} \right) + o(1) \right]. \end{aligned} \quad (6)$$

Далее все зависит от соотношения между s_1 и s_2 .

1 случай. Если число полюсов максимального модуля $\mu = 1$, то второе слагаемое в асимптотике (6) отсутствует, а при $\mu > 1$, $s_1 > s_2 + 2$ преобладает первое слагаемое. Поэтому, в этих случаях

$$\Delta_{k,m} = k^{2s_1-4} z_1^{2k+m} \left[(m+1)(s_1-1)C_1^2 + o(1) \right].$$

В частности, это означает, что старший коэффициент $\Delta_{k,0}$ многочлена $V_k^{(2)}(z)$ отличен от нуля для всех достаточно больших k и потому этот многочлен может быть $(\lambda-2)$ -нормирован. Пусть $V_k^{(2)}(z)$ – $(\lambda-2)$ -нормирован. Так как $\frac{\Delta_{k,m}}{\Delta_{k,0}} \rightarrow (m+1)z_1^m$ при $k \rightarrow \infty$, то существует $\lim_{k \rightarrow \infty} V_k^{(2)}(z)$. Вычисление этого предела не представляет труда, и мы получаем

$$\lim_{k \rightarrow \infty} V_k^{(2)}(z) = \frac{D(z)}{(z - z_1)^2}.$$

Применение подготовительной теоремы дает следующий результат.

Теорема 2. Пусть $\mu = 1$ или $\mu > 1$, $s_1 > s_2 + 2$. Тогда при всех достаточно больших n знаменатель $Q_{n,\lambda-2}(z)$ аппроксимации Паде типа $(n, \lambda-2)$ мероморфной функции $a(z)$ может быть $(\lambda-2)$ -нормирован и для нормированных знаменателей существует

$$\lim_{k \rightarrow \infty} Q_{n,\lambda-2}(z) = \frac{D(z)}{(z - z_1)^2}.$$

▲

Ясно, что в условиях этой теоремы существует предел $\pi_{n,\lambda-2}$ для всей $(\lambda-2)$ -й строки.

2 случай. Пусть $s_1 = s_2 + 1$. В этой ситуации в асимптотике (6) остается только второе слагаемое:

$$\Delta_{k,m} = k^{s_1+s_2-2} z_1^{2k-1} \left[\sum_{i=2}^{v_2+1} \left(\frac{z_i}{z_1} \right)^{k-1} \frac{z_i - z_1}{z_1} C_i C_1 \left(z_1^{m+1} - z_i^{m+1} \right) + o(1) \right]. \quad (7)$$

Пусть $\frac{z_2}{z_1} = e^{2\pi i \Theta_1^{(2)}}, \dots, \frac{z_{v_2+1}}{z_1} = e^{2\pi i \Theta_{v_2}^{(2)}}$. Обозначим $F_2 = \overline{\left\{ e^{2\pi i n \Theta_1^{(2)}}, \dots, e^{2\pi i n \Theta_{v_2}^{(2)}} \right\}}_{n \geq 0}$ монотонную подгруппу тора T^{v_2} , порожденную $\Theta_1^{(2)}, \dots, \Theta_{v_2}^{(2)}$. Она может быть найдена явно таким же образом, как и группа $F_1 \equiv F$, соответствующая доминирующему полюсам первого уровня (см. [1]).

По определению этой группы для любого $\tau = (\tau_1, \dots, \tau_{v_2}) \in F_2$ существует последовательность номеров Λ_τ такая, что $\lim_{n \rightarrow \infty} \left(e^{2\pi i n \Theta_1^{(2)}}, \dots, e^{2\pi i n \Theta_{v_2}^{(2)}} \right) = \tau$, $n \in \Lambda_\tau$.

Обозначим $S_m^{(2)}(\tau) = \sum_{i=2}^{\nu_2+1} C_i \tau_i \left(1 - \frac{z_1}{z_i}\right) \left(z_1^{m+1} - z_i^{m+1}\right)$. Эти суммы играют роль сумм $S_m^{(1)}(\tau) \equiv S_m(\tau)$, которые были определены в [1] для полюсов первого уровня. Следующее предложение является аналогом предложения 6.1 из [1] и доказывается подобным образом.

Предложение 1. Среди любых ν_2 чисел $S_k^{(2)}(\tau), S_{k+1}^{(2)}(\tau), \dots, S_{k+\nu_2-1}^{(2)}(\tau)$ существует хотя бы одно отличное от нуля. ▲

Целое неотрицательное число $\delta_+^{(2)}(\tau)$ будем называть *плюс-дефектом* точки $\tau \in F_2$, если $\delta_+^{(2)}(\tau)$ наименьшее число такое, что $S_{\delta_+^{(2)}(\tau)}(\tau) \neq 0$. Из предложения 1 следует, что $0 \leq \delta_+^{(2)}(\tau) \leq \nu_2 - 1$. При фиксированном τ мы будем использовать более короткое обозначение $\delta_+^{(2)}$.

Теорема 3. Пусть $\nu_1 = 1$, $s_1 = s_2 + 1$, τ – произвольная точка группы F_2 , а Λ_τ – соответствующая ей последовательность номеров. Пусть $\delta_+^{(2)}$ – плюс-дефект точки τ .

Тогда для всех достаточно больших $n \in \Lambda_\tau - \lambda$ знаменатель $Q_{n,\lambda-2}(z)$ аппроксимации Паде типа $(n, \lambda-2)$ для $a(z)$ можно $(\lambda - \delta_+^{(2)} - 2)$ -нормировать и для последовательности нормированных многочленов $Q_{n,\lambda-2}(z)$ существует предел

$$\lim_{n \rightarrow \infty} Q_{n,\lambda-2}(z) = W^{(2)}(z, \tau), \quad n \in \Lambda_\tau - \lambda.$$

Здесь $W^{(2)}(z, \tau)$ – многочлен степени $\lambda - \delta_+^{(2)} - 2$, вычисляющийся по формуле:

$$W^{(2)}(z, \tau) = \frac{1}{S_{\delta_+^{(2)}}^{(2)}(\tau)} \omega^{(2)}(z, \tau) \frac{D(z)}{(z - z_1) \dots (z - z_{\nu_2+1})},$$

$$\omega^{(2)}(z, \tau) = \sum_{j=2}^{\nu_2+1} C_j \tau_j \frac{(z_j - z_1)^2}{z_j} \Delta_j^{(2)}(z),$$

$$\Delta_j^{(2)}(z) = \frac{\Delta^{(2)}(z)}{z - z_j}, \quad \Delta^{(2)}(z) = (z - z_2) \dots (z - z_{\nu_2+1}).$$

В частности, при $\nu_1 = \nu_2 = 1$ существует предел всей последовательности $Q_{n,\lambda-2}(z)$ равный $\frac{D(z)}{(z - z_1)(z - z_2)}$.

Все возможные пределы сходящихся подпоследовательностей каким-либо образом нормированных $Q_{n,\lambda-2}(z)$ исчерпываются многочленами $W^{(2)}(z, \tau)$.

Схема доказательства этой теоремы теперь уже стандартна. Асимптотика (7) вместе с явной формулой (5) для $V_k^{(2)}(z)$ позволяет явно найти $\lim_{k \rightarrow \infty} V_k^{(2)}(z)$, $k \in \Lambda_\tau$, а следовательно и предел знаменателя $Q_{n,\lambda-2}(z) = V_{n+\lambda}^{(2)}(z)$ аппроксимации Паде для рациональной дроби $r(z)$. Применение подготовительной теоремы заканчивает доказательство. Заметим, что, как и в работе [1], можно было определить минус-дефект точки τ . При этом кратность нуля $z = 0$ многочлена $W^{(2)}(z, \tau)$ совпадает с минус-дефектом. ▲

3 случай. Пусть $s_1 = s_2 + 2$. Теперь асимптотика $\Delta_{k,m}$ имеет вид

$$\Delta_{k,m} = k^{2s_1-4} z_1^{2k+m} C_1 \left[(m+1)(s_1-1)C_1 + \sum_{i=2}^{\nu_2+1} C_i \left(\frac{z_i}{z_1}\right)^k \left(1 - \frac{z_1}{z_i}\right) \left(1 - \left(\frac{z_i}{z_1}\right)^{m+1}\right) + o(1) \right];$$

группа F_2 определяется так же, как в предыдущем случае; и

$$S_m^{(2)}(\tau) = (m+1)(s_1-1)C_1 z_1^{m+1} + \sum_{i=2}^{\nu_2+1} C_i \tau_i \left(1 - \frac{z_1}{z_i}\right) \left(z_1^{m+1} - z_i^{m+1}\right).$$

Для сумм $S_m^{(2)}(\tau)$ справедлив аналог предложения 1 (только длина последовательности теперь равна $\nu_2 + 1$), так же определяется плюс-дефект $\delta_+^{(2)}(\tau)$, $0 \leq \delta_+^{(2)}(\tau) \leq \nu_2$. Как и ранее, может быть доказана

Теорема 4. Пусть $\nu_1 = 1$, $s_1 = s_2 + 2$, τ – произвольная точка группы F_2 , а Λ_τ – соответствующая ей последовательность номеров. Пусть $\delta_+^{(2)}$ – плюс-дефект точки τ .

Тогда для всех достаточно больших $n \in \Lambda_\tau - \lambda$ знаменатель $Q_{n,\lambda-2}(z)$ аппроксимации Паде типа $(n, \lambda - 2)$ для мероморфной функции $a(z)$ можно $(\lambda - \delta_+^{(2)} - 2)$ -нормировать и для последовательности нормированных многочленов $Q_{n,\lambda-2}(z)$ существует предел

$$\lim_{n \rightarrow \infty} Q_{n,\lambda-2}(z) = \frac{1}{S_{\delta_+^{(2)}}^{(2)}(\tau)} \omega^{(2)}(z, \tau) \frac{D(z)}{(z - z_1)^2 (z - z_2) \dots (z - z_{\nu_2+1})},$$

$n \in \Lambda_\tau - \lambda$, где

$$\begin{aligned} \omega^{(2)}(z, \tau) &= C_1(s_1-1)z_1 \Delta_1^{(2)}(z) + \sum_{j=2}^{\nu_2+1} C_j \tau_j \frac{(z_j - z_1)^2}{z_j} \Delta_j^{(2)}(z), \\ \Delta_j^{(2)}(z) &= \frac{\Delta^{(2)}(z)}{z - z_j}, \quad \Delta^{(2)}(z) = (z - z_1) \dots (z - z_{\nu_2+1}). \end{aligned}$$

В частности, при $\nu_1 = \nu_2 = 1$ существует предел всей последовательности $Q_{n,\lambda-2}(z)$ равный $\frac{D(z)}{(z - z_1)(z - z_2)}$.

Все возможные пределы сходящихся подпоследовательностей каким-либо образом нормированных $Q_{n,\lambda-2}(z)$ исчерпываются многочленами $W^{(2)}(z, \tau)$. ▲

Таким образом, асимптотика знаменателей $Q_{n,\lambda-2}(z)$ для одного доминирующего полюса первого уровня получена и в этом случае мы знаем все предельные точки полюсов аппроксимаций Паде. Как и в работе [1] мы можем теперь исследовать равномерную сходимость подпоследовательностей аппроксимаций Паде $\pi_{n,\lambda-2}(z)$, что в свою очередь позволяет найти множество, внутри которой предпоследняя промежуточная строка сходится равномерно.

Асимптотика знаменателя $Q_{n,\lambda-2}(z)$ для предпоследней промежуточной строки может быть исследована и в других случаях, которые мы здесь не рассматриваем, поскольку цель этой работы – продемонстрировать, что эффективность метода статьи [1] не ограничивается последней промежуточной строкой.

Работа выполнена при поддержке РФФИ-Урал, грант № 04-01-96006.

Литература

1. Adukov V.M. The uniform convergence of subsequences of the last intermediate row of the Padé table// J. Approx. Theory – 2003. – V. 122. – P. 160–207.
2. Бейкер Дж., мл., Грейвс-Моррис П. Аппроксимации Паде. – М.: Мир, 1986. – 502 с.
3. Sidi A. Quantitative and constructive aspects of the generalized Koenig's and de Montessus's theorems for Padé approximants// J. Comput. Appl. Math. – 1990. – V. 29. – P. 257–291.
4. Adukov V.M. Generalized inversion of block Toeplitz matrices// Linear Algebra Appl. – 1998. – V. 274. – P. 85–124.

Поступила в редакцию 24 сентября 2004 г.

ОБ ЕДИНСТВЕННОСТИ И УСТОЙЧИВОСТИ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ЛИНЕЙНОЙ АППРОКСИМАЦИИ ПАДЕ–ЧЕБЫШЕВА

В.М. Адуков, О.Л. Ибрыева

Изучена задача линейной аппроксимации Паде–Чебышева. Получено достаточное условие существования, единственности и устойчивости решения этой задачи.

1. Введение

В данной работе речь пойдет о линейных аппроксимациях Паде–Чебышева, являющихся одним из обобщений классических аппроксимаций Паде. Напомним, что аппроксимацией Паде типа (n,m) называется рациональная функция, разложение в ряд Тейлора которой совпадает с разложением аппроксимируемой функции до члена порядка $n+m$ включительно. Числителем этой дроби является многочлен формальной степени n , знаменателем – многочлен формальной степени m .

Это определение естественным образом обобщается на случай функций, разлагающихся в ряд по ортогональным многочленам.

Определение 1.1. Пусть функция $f(z)$ разложена в ряд по многочленам Чебышева $T_i(z)$:

$$f(z) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i T_i(z) = \frac{1}{2} a_0 + a_1 T_1(z) + a_2 T_2(z) + \dots$$

Линейной аппроксимацией Паде–Чебышева типа (n,m) функции $f(z)$ называется рациональная дробь $R_{n,m}(z) = \frac{P_{n,m}(z)}{Q_{n,m}(z)}$, где $P_{n,m}(z), Q_{n,m}(z)$ – многочлены, такие, что $\deg P_{n,m}(z) \leq n$, $\deg Q_{n,m}(z) \leq m$, $Q_{n,m}(z) \neq 0$ и выполняется соотношение $Q_{n,m}(z)f(z) - P_{n,m}(z) = \sum_{k=n+m+1}^{\infty} c_k T_k(z)$.

В дальнейшем мы будем опускать индексы n, m , поскольку всегда будем иметь дело с аппроксимацией Паде–Чебышева фиксированного типа (n,m) .

Известно, что задача нахождения линейных аппроксимаций Паде–Чебышева сводится к задаче о структуре ядра теплиц–плюс–ганкелевых матриц.

В самом деле, воспользовавшись формулой для умножения многочленов Чебышева

$$\begin{aligned} T_i(z)T_j(z) &= \frac{1}{2}(T_{i+j}(z) + T_{|i-j|}(z)), \text{ получаем } f(z)Q(z) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i T_i(z) \sum_{j=0}^m q_j T_j(z) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^m a_i q_j [T_{|i-j|}(z) + T_{i+j}(z)] = \frac{1}{2} \sum_{i=0}^{\infty} \left[\sum_{j=0}^m q_j (a_{i+j} + a_{|i-j|}) \right] T_i(z). \end{aligned}$$

Таким образом, для определения коэффициентов линейной аппроксимации Паде–Чебышева имеем следующие системы уравнений:

$$\sum_{j=0}^m q_j (a_{|i-j|} + a_{i+j}) = 0, \quad i = n+1, \dots, n+m, \quad (1)$$

$$1/2 \sum_{j=0}^m q_j (a_{|i-j|} + a_{i+j}) = p_i, \quad i = 0, \dots, n. \quad (2)$$

Система однородных уравнений (1) позволяет определить коэффициенты знаменателя $Q(z)$ по данным коэффициентам ряда, затем уравнения (2) определяют коэффициенты числителя $P(z)$ по найденным коэффициентам знаменателя. Матрица системы (1) имеет вид

$$\begin{pmatrix} a_{|n+1|} + a_{n+1} & a_{|n|} + a_{n+2} & \dots & a_{|n-m+1|} + a_{n+m+1} \\ a_{|n+2|} + a_{n+2} & a_{|n+1|} + a_{n+3} & \dots & a_{|n-m+2|} + a_{n+m+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{|n+m|} + a_{n+m} & a_{|n+m-1|} + a_{n+m+1} & \dots & a_{|n|} + a_{n+2m} \end{pmatrix}.$$

Так как ее размеры $m \times (m+1)$, то однородная система (1) всегда имеет ненулевое решение. Это означает, что линейная аппроксимация Паде–Чебышева всегда существует.

Для простоты, мы будем полагать $n \geq m-1$ (это означает, что мы рассматриваем только верхнюю часть таблицы Паде–Чебышева). Тогда модули у элементов только что приведенной матрицы можно отбросить и мы получим следующую теплиц-плюс-гандеклеву матрицу

$$S_{n+1} = \begin{pmatrix} a_{n+1} + a_{n+1} & a_n + a_{n+2} & \dots & a_{n-m+1} + a_{n+m+1} \\ a_{n+2} + a_{n+2} & a_{n+1} + a_{n+3} & \dots & a_{n-m+2} + a_{n+m+2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n+m} + a_{n+m} & a_{n+m-1} + a_{n+m+1} & \dots & a_n + a_{n+2m} \end{pmatrix}.$$

Вектор, составленный из коэффициентов q_i разложения по многочленам Чебышева знаменателя $Q(z)$, принадлежит ядру этой матрицы. Коэффициенты p_i разложения числителя $P(z)$ по многочленам Чебышева находятся из условия (1.3) умножением матрицы

$$M = \begin{pmatrix} a_0 + a_0 & a_1 + a_1 & \dots & a_m + a_m \\ a_1 + a_1 & a_0 + a_2 & \dots & a_{m-1} + a_{m+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_n + a_n & a_{n-1} + a_{n+1} & \dots & a_{|n-m|} + a_{n+m} \end{pmatrix} \quad (4)$$

на вектор, составленный из коэффициентов q_i .

Задача нахождения линейной аппроксимации Паде–Чебышева является некорректной по Адамару. Действительно, эта задача сводится к задаче нахождения ядра матрицы и потому является неустойчивой. Кроме того, ее решение находится, вообще говоря, неединственным образом, так как знаменатель $Q(z)$ находится неединственным образом. Это приводит к тому, что при малых возмущениях $f(z)$ при нахождении знаменателя аппроксимации мы можем «перескочить» на знаменатель другой аппроксимации Паде–Чебышева и, соответственно, получить другую аппроксимацию. (Отметим, что для классических аппроксимаций Паде неединственность знаменателя также имеет место, но это не вызывает неединственности самой аппроксимации Паде.) Следующий пример и демонстрирует неустойчивость решения задачи линейной аппроксимации Паде–Чебышева, проистекающую из ее неединственности.

Пример. Найдем линейную аппроксимацию Паде–Чебышева типа (2,3) для функции, разложение по $T_k(x)$ которой имеет вид $f(x) = \frac{1}{2}T_0(x) + T_1(x) + T_2(x) + T_6(x) + T_7(x) + T_8(x)$. (Мы делаем это с помощью написанной нами в пакете Maple б процедурой.)

Как оказывается, в данном случае решение этой задачи неединственно и мы имеем две различные аппроксимации, графики которых представлены ниже на рисунке. На этом же рисунке представлены линейные аппроксимации Паде–Чебышева для функции

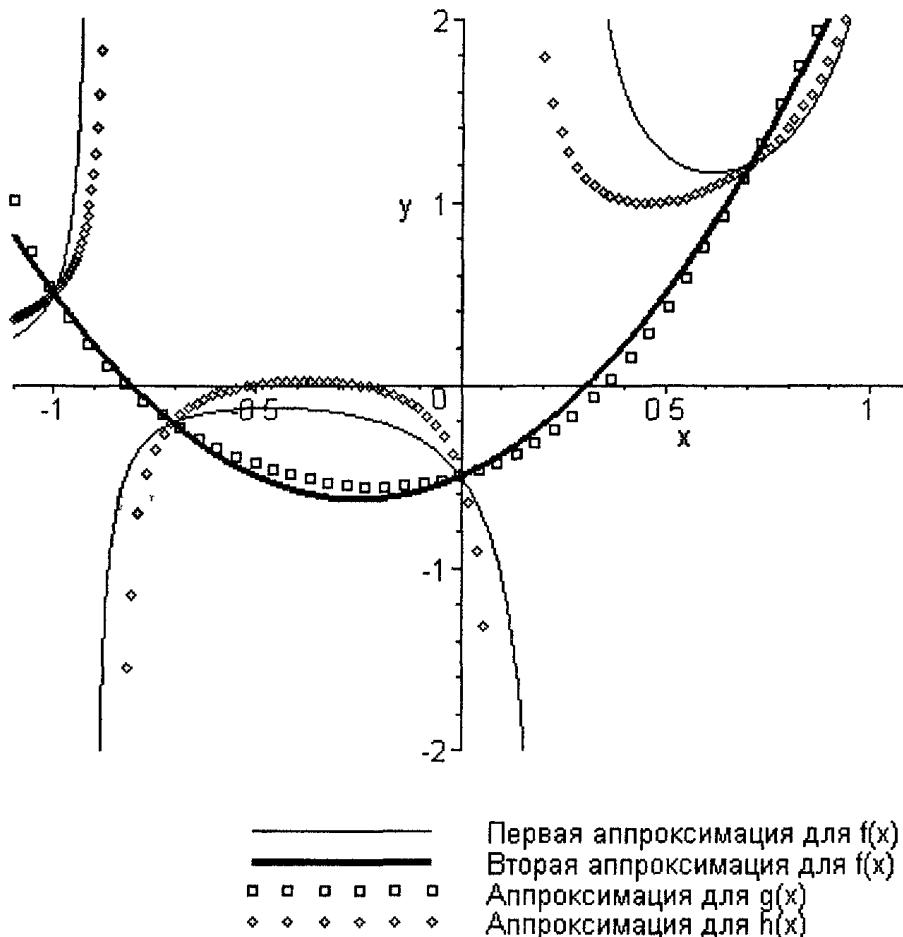
$$g(x) = \frac{1,0001}{2}T_0(x) + 0,9999T_1(x) + 1,00001T_2(x) + 0,00001T_4(x) + \\ + 0,00001T_5(x) + 1,00001T_6(x) + 0,9999T_7(x) + 0,9999T_8(x)$$

и функции

$$h(x) = \frac{0,9999}{2}T_0(x) + 0,9999T_1(x) + 1,00001T_2(x) - 0,00001T_4(x) - 0,0001T_5(x) + 1,00001T_6(x) + \\ + 0,9999T_7(x) + 0,9999T_8(x).$$

Эти функции, очевидно, являются малыми возмущениями функции $f(x)$. Однако для каждой из них ядро матрицы S_{n+1} оказывается одномерным и линейная аппроксимация – единственной.

Из рисунка видно, что линейная аппроксимация Паде–Чебышева для функции $g(x)$ близка ко второй линейной аппроксимации Паде–Чебышева для $f(x)$, а линейная аппроксимация Паде–Чебышева для функции $h(x)$ близка к первой аппроксимации для $f(x)$.



Итак, при малых возмущениях исходной функции мы получаем сильно отличающиеся линейные аппроксимации Паде–Чебышева. Это и показывает неустойчивость решения данной задачи. Приведенный пример показывает также, что перед рассмотрением вопроса устойчивости аппроксимаций, естественно сначала попытаться разобраться с их неединственностью.

Цель данной работы – выяснить причины неединственности линейной аппроксимации Паде–Чебышева и найти условия, при которых решение данной задачи будет единствено и устойчиво. То, что оно всегда существует, мы уже отмечали ранее.

2. Параметризация числителя и знаменателя линейной аппроксимации Паде–Чебышева

Причины неединственности линейной аппроксимации Паде–Чебышева становятся ясными после изучения структуры множества ее знаменателей. В свою очередь, эта задача приводится к изучению структуры ядра теплиц-плюс-ганкелевых матриц. Используемый нами подход основан на понятиях индексов и существенных многочленов и является обобщением метода статьи [1].

Чтобы изучить структуру ядра матрицы S_{n+1} , включим ее в семейство матриц $S_k = \|a_{i-j+k} + a_{n+1+i+j}\| \quad i = 0, 1, \dots, n+m-k, \quad n-m+1 \leq k \leq n+m$, и исследуем структуру ядер матриц S_k .

Матрицы S_k порождены последовательностью чисел $a_{n-m+1}^{n+2m} \equiv \{a_{n-m+1}, \dots, a_{n+2m}\}$, которые мы будем называть $T + H$ последовательностью. Иногда, чтобы указать, что S_k порождены конкретной $T + H$ последовательностью, мы также будем использовать обозначение $S_k(a_{n-m+1}^{n+2m})$.

Формула (2) показывает, что для нахождения и числителя и знаменателя линейной аппроксимации Паде–Чебышева требуется последовательность $a_0^{n+2m} \equiv \{a_0, \dots, a_{n+2m}\}$.

Для удобства перейдем от пространств $\ker S_k$ к изоморфным пространствам N_k производящих векторных многочленов.

Для описания структуры ядра теплиц-плюс-ганделевых матриц нам предпочтительнее использовать производящие векторные многочлены по z^k , то есть вектору $(r_0 \ r_1 \ \dots \ r_{k-n+m-1})^T$ из ядра матрицы S_k поставить в соответствие многочлен $r_0 + r_1 z + \dots + r_{k-n+m-1} z^{k-m+m-1}$ из пространства N_k .

Справедливо вложение $zN_k + (z+1)N_{k+1} \subseteq N_{k+2}$ (см. [2]), в котором, за исключительными случаями, всегда стоит знак равенства. Номера k исключительных случаев мы называем *индексами* и обозначаем μ_i . Базис дополнения H_{μ_i+2} пространства $zN_{\mu_i} + (z+1)N_{\mu_i+1}$ до N_{μ_i+2} образуют так называемые *существенные многочлены*.

Ограничимся только регулярным случаем $T + H$ последовательности, когда матрицы $S_{n-m+1}, S_{n-m+2}, S_{n+m-1}, S_{n+m}$ имеют полный ранг. Тогда мы имеем четыре индекса $\mu_1 \leq \dots \leq \mu_4$, сумма которых равна $4n+4$, и четыре существенных многочлена $R_1(z), \dots, R_4(z)$, с помощью которых можно описать структуру ядер матриц из семейства S_k (см. [3]).

Элементы базиса пространств N_k могут быть записаны с помощью производящих многочленов по переменной z^k . Однако в задаче нахождения линейных аппроксимаций Паде–Чебышева (для описания структуры множества ее знаменателей и числителей) предпочтительнее использовать производящие функции по многочленам Чебышева. Для вектора $(r_0 \ r_1 \ \dots \ r_{k-n+m-1})^T$ производящая функция по многочленам Чебышева имеет вид

$$r_0 T_0(z) + r_1 T_1(z) + \dots + r_{k-n+m-1} T_{k-n+m-1}(z).$$

Определим

$$Q_{[\frac{k-\mu_j}{2}]}(z) = \sum_{i=0}^{m-k+\mu_j} R_i \left(T_{i+[\frac{k-\mu_j}{2}]}(z) + T_{i+[\frac{k-\mu_j+1}{2}]}(z) \right), \quad (5)$$

где R_i – коэффициенты вектора из ядра S_{μ_j+1} , образующего соответствующий существенный многочлен.

Тогда (см. [3]):

$$\left\{ T_{[\frac{k-\mu_j}{2}]}(z) Q_{[\frac{k-\mu_j}{2}]}(z), T_{[\frac{k-\mu_j}{2}-1]}(z) Q_{[\frac{k-\mu_j}{2}]}(z), \dots, T_1(z) Q_{[\frac{k-\mu_j}{2}]}(z), Q_{[\frac{k-\mu_j}{2}]}(z) \right\}_{j=1}^l \quad (6)$$

являются производящими функциями по $T_j(z)$ для элементов базиса $\ker S_{k+1}$.

Отсюда легко следует [3], что знаменатель $Q(z)$ линейной аппроксимации Паде–Чебышева представляется в виде

$$Q(z) = q_1(z) Q_{[\frac{n-\mu_1}{2}]}(z) + q_2(z) Q_{[\frac{n-\mu_2}{2}]}(z) + q_3(z) Q_{[\frac{n-\mu_3}{2}]}(z). \quad (7)$$

Здесь введены обозначения $q_1(z) = \sum_{i=0}^{[\frac{n-\mu_1}{2}]} \alpha_i T_i(z)$, $q_2(z) = \sum_{i=0}^{[\frac{n-\mu_2}{2}]} \beta_i T_i(z)$, $q_3(z) = \sum_{i=0}^{[\frac{n-\mu_3}{2}]} \gamma_i T_i(z)$, где числа $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$ – это произвольные параметры (коэффициенты разложения Q по элементам базиса (6) $\ker S_{n+1}$). Пустую сумму, как обычно, считаем равной нулю.

Аналогично, числитель $P(z)$ линейной аппроксимации Паде–Чебышева представляется в виде

$$P(z) = q_1(z) P_{[\frac{n-\mu_1}{2}]}(z) + q_2(z) P_{[\frac{n-\mu_2}{2}]}(z) + q_3(z) P_{[\frac{n-\mu_3}{2}]}(z), \quad (8)$$

где $P_{[\frac{n-\mu_1}{2}]}(z)$ – числитель аппроксимации, знаменателем которой является $Q_{[\frac{n-\mu_1}{2}]}(z)$, R_i – коэффициенты вектора из $\ker S_{\mu_1+1}$, образующего соответствующий существенный многочлен, а многочлены $q_1(z), q_2(z), q_3(z)$ те же, что и в представлении знаменателя (7).

Формулы (7), (8) и дают параметризацию множества знаменателей и числителей аппроксимации Паде–Чебышева. Заметим, что для классических аппроксимаций Паде аналогичное представление числителей и знаменателей содержит не три слагаемых, как в (7), (8), а только одно.

3. Достаточное условие единственности линейной аппроксимации Паде–Чебышева

Из предыдущего пункта мы знаем, что числитель и знаменатель линейной аппроксимации Паде–Чебышева представляются в виде суммы трех слагаемых. Это и является причиной ее неединственности. Установим достаточное условие единственности линейной аппроксимации Паде–Чебышева.

Для этого выделим случай $\mu_1 \leq n < \mu_2$, когда последние две суммы в (7), (8) будут пустыми. Тогда представление числителя и знаменателя содержит только одно слагаемое и линейная аппроксимация Паде–Чебышева равна

$$\frac{P(z)}{Q(z)} = \frac{P_{[\frac{n-\mu_1}{2}]}(z) \sum_{i=0}^{[\frac{n-\mu_1}{2}]} \alpha_i T_i(z)}{Q_{[\frac{n-\mu_1}{2}]}(z) \sum_{i=0}^{[\frac{n-\mu_1}{2}]} \alpha_i T_i(z)} = \frac{P_{[\frac{n-\mu_1}{2}]}(z)}{Q_{[\frac{n-\mu_1}{2}]}(z)}, \text{ т.е. определяется единственным образом.}$$

Итак, мы получили следующее достаточное условие единственности.

Теорема 3.1. [3] *Если индексы последовательности a_{n-m+1}^{n+2m} удовлетворяют условию $\mu_1 \leq n < \mu_2$, то решение задачи линейной аппроксимации Паде–Чебышева единствено.*

Замечание 3.1. Нетрудно проверить, что следующие условия равносильны: матрица $S_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m})$ имеет полный ранг и индексы последовательности a_{n-m+1}^{n+2m} принимают значения $\mu_1 = n, \mu_2 = \mu_3 = n+1, \mu_4 = n+2$. Таким образом, условие $\mu_1 \leq n < \mu_2$ выполняется в случае общего положения (матрица S_{n+1} имеет полный ранг). Это означает, что, как правило, линейная аппроксимация Паде–Чебышева оказывается единственной.

4. Устойчивость

В случае аппроксимаций Паде и связанной с ними задачи о структуре ядра теплицевых матриц необходимым и достаточным условием устойчивости индексов μ_1, μ_2 оказывается условие $\mu_2 - \mu_1 \leq 1$ [4].

В этом параграфе мы собираемся показать, что условие $\mu_4 - \mu_1 \leq 2$ является достаточным для устойчивости индексов $T + H$ последовательности, что в свою очередь приводит к устойчивости аппроксимации Паде–Чебышева. Точнее, мы собираемся доказать, что справедлива следующая.

Теорема 4.1. *Если индексы последовательности a_{n-m+1}^{n+2m} удовлетворяют условию $\mu_4 - \mu_1 \leq 2$, то решение задачи линейной аппроксимации Паде–Чебышева существует, единствено и устойчиво.*

Скорее всего, это условие является и необходимым. Мы в этой статье ограничимся пока только доказательством достаточности.

Утверждение теоремы о существовании решения этой задачи не вызывает сомнений и уже отмечалось ранее.

Прежде, чем перейти к доказательству остальной части теоремы, приведем несколько лемм и предложений, которые будут нам полезны.

Всюду далее для матриц из $C^{k \times l}$ мы будем использовать максимальную столбцовую норму:
 $\|A\| = \max_{1 \leq j \leq l} \sum_{i=1}^k |A_{ij}|$. Для числовой последовательности $a_M^N = \{a_M, a_{M+1}, \dots, a_N\}$ введем
 $\|a_M^N\| = \sum_{i=M}^N |a_i|$. Эту же норму будем использовать для производящего многочлена как по z^k , так
и по $T_k(z)$ этой последовательности.

Предложение 4.1. Если для индексов $T + H$ последовательности a_{n-m+1}^{n+2m} , возникающей в задаче нахождения знаменателя линейной аппроксимации Паде–Чебышева типа (n, m) , выполняется условие

$$\mu_4 - \mu_1 \leq 2, \quad (9)$$

то индексы являются устойчивыми.

Пусть условие (9) выполнено. Тогда на самом деле $\mu_4 - \mu_1 = 2$, и индексы принимают значения $\mu_1 = n, \mu_2 = \mu_3 = n+1, \mu_4 = n+2$.

Доказательство. Пусть для индексов $T + H$ последовательности, возникающей в задаче нахождения знаменателя линейной аппроксимации Паде–Чебышева типа (n, m) , выполняется условие $\mu_4 - \mu_1 \leq 2$.

Очевидно, что $\mu_4 - \mu_1 \neq 0$. Действительно, если бы это условие выполнялось, то все индексы были бы равны $n+1$. Это, в частности, означает, что $\dim \ker S_{n+1} = 0$. С другой стороны, $\dim \ker S_{n+1} = m+1 - \text{rank } S_{n+1}$. Тогда $\text{rank } S_{n+1} = m+1$, что невозможно, так как у этой матрицы всего m строк.

Значит, остаются возможными случаи $\mu_4 - \mu_1 = 1$ и $\mu_4 - \mu_1 = 2$.

Рассмотрим случай $\mu_4 - \mu_1 = 1$. *A priori* возможны следующие значения индексов:

1. $\mu, \mu, \mu, \mu+1$,
2. $\mu, \mu, \mu+1, \mu+1$,
3. $\mu, \mu+1, \mu+1, \mu+1$.

Сумма всех индексов должна быть равна $4n+4$. Подсчитывая сумму индексов в каждом случае, убеждаемся, что это невозможно. Значит, остается лишь случай $\mu_4 - \mu_1 = 2$.

В этом случае *a priori* возможны следующие значения индексов:

- | | | |
|---------------------------------|---------------------------------|---------------------------------|
| 1. $\mu, \mu, \mu, \mu+2$, | 2. $\mu, \mu, \mu+1, \mu+2$, | 3. $\mu, \mu, \mu+2, \mu+2$, |
| 4. $\mu, \mu+1, \mu+1, \mu+2$, | 5. $\mu, \mu+1, \mu+2, \mu+2$, | 6. $\mu, \mu+2, \mu+2, \mu+2$. |

Из выражения для суммы индексов сразу следует, что случаи 1, 2, 5, 6 невозможны. Случаи 3 и 4 теоретически остаются возможными для значения $\mu = n$. Однако случай 3 все же не осуществляется.

Действительно, в этом случае индексы принимают значения $n, n, n+2, n+2$. Это, в частности, означает, что $\dim \ker S_{n+2} = 2$. Тогда ранг этой матрицы равен m . Но это невозможно, так как матрица S_{n+2} имеет размеры $(m-1) \times (m+2)$.

Таким образом, если $\mu_4 - \mu_1 \leq 2$, то индексы принимают значения $n, n+1, n+1, n+2$. Докажем, что такие индексы будут устойчивыми.

Из определения индексов следует, что матрица S_n обратима слева и S_{n+2} обратима справа.

Пусть $\tilde{f}(z) = f(z) + \varepsilon(z)$, где $\varepsilon(z)$ – малое возмущение аппроксимируемой функции $f(z)$. Пусть \tilde{a}_0^{n+2m} – возмущенная a_0^{n+2m} последовательность, возникающая в задаче линейной аппроксимации Паде–Чебышева типа (n, m) этой функции $\tilde{f}(z)$. Тогда матрица $S_n(\tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m})$ достаточно близка по норме к $S_n(a_{n-m+1}^{n+2m})$, а матрица $S_{n+2}(\tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m})$ к $S_{n+2}(a_{n-m+1}^{n+2m})$.

Тогда, в силу устойчивости свойства односторонней обратимости при малых возмущениях, матрица $S_n(\tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m})$ обратима слева и $S_{n+2}(\tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m})$ обратима справа. Значит, индексы возмущенной последовательности:

$$n \leq \tilde{\mu}_1 \leq \tilde{\mu}_2 \leq \tilde{\mu}_3 \leq \tilde{\mu}_4 \leq n+2.$$

Докажем, что $\tilde{\mu}_1 = n$, $\tilde{\mu}_4 = n+2$. Из выражения для суммы индексов следует, что $\tilde{\mu}_1 \leq n+1$. Предположим, $\tilde{\mu}_1 = n+1$, тогда $\tilde{\mu}_2 = \tilde{\mu}_3 = \tilde{\mu}_4 = n+1$, что невозможно, следовательно, $\tilde{\mu}_1 = n$. Аналогично, $\tilde{\mu}_4 = n+2$. Тогда $\tilde{\mu}_4 - \tilde{\mu}_1 \leq 2$ и, по ранее доказанной части теоремы, индексы возмущенной последовательности равны $n, n+1, n+1, n+2$.

Итак, мы показали, что в случае $\mu_4 - \mu_1 \leq 2$ индексы принимают значения $n, n+1, n+1, n+2$ и являются устойчивыми. Предложение доказано.

Из только что доказанного предложения 4.1 и теоремы 3.1 сразу получается

Следствие 4.1. Если $\mu_4 - \mu_1 \leq 2$, то линейная аппроксимация Паде–Чебышева определяется единственным образом.

Утверждение теоремы 4.1 об единственности решения задачи линейной аппроксимации Паде–Чебышева также доказано. Перейдем к вопросу ее устойчивости.

Пусть $\tilde{f}(z) = f(z) + \varepsilon(z)$. Тогда последовательность \tilde{a}_0^{n+2m} , составленная из коэффициентов разложения в ряд по многочленам Чебышева функции $\tilde{f}(z)$, будет являться возмущением последовательности a_0^{n+2m} . Матрица $S_{n+1}(\tilde{a}_{n+m-1}^{n+2m})$, как и матрица $S_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m})$ также имеет полный ранг и одномерное ядро (в силу устойчивости свойства односторонней обратимости при малых возмущениях).

Как уже отмечалось в предложении 4.1, индексы устойчивы и, следовательно, совпадают для возмущенной и невозмущенной $T+H$ последовательности. Значит, решение задачи линейной аппроксимации типа (n,m) для функции $\tilde{f}(z)$ также существует и единствено.

Докажем устойчивость задачи линейной аппроксимации Паде–Чебышева, т.е., что при достаточно малых возмущениях $\varepsilon(z)$ линейные аппроксимации $\frac{P}{Q}$ для функции $f(z)$ и $\frac{\tilde{P}}{\tilde{Q}}$ для функции $\tilde{f}(z)$ будут близки. Для этого докажем сначала устойчивость знаменателя аппроксимации Паде–Чебышева, затем ее числителя, и, наконец, устойчивость и самой аппроксимации.

Нам потребуются две леммы.

Лемма 4.1. (см., например, [5]) Пусть A – обратимый справа оператор, действующий из банахова пространства E_1 в банахово пространство E_2 . Пусть A^\dagger – любой правосторонний обратный к A и $P_A = I - A^\dagger A$ – проектор на $\ker A$.

Тогда для любого оператора B , удовлетворяющего неравенству $\|A - B\| < \frac{1}{2\|A^\dagger\|}$, справедливо: B – обратимый справа оператор и $B^\dagger = C^{-1}A^\dagger$ – правый обратный к B . Здесь $C = I - A^\dagger(A - B)$, $C^{-1} = \sum_{j=0}^{\infty} (A^\dagger(A - B))^j$.

Для проектора $P_B = I - B^\dagger B = C^{-1}P_A C$ на $\ker B$ выполняется следующее неравенство: $\|P_A - P_B\| \leq \text{const} \|A - B\|$.

Лемма 4.2. Пусть a_{n-m+1}^{n+2m} – некоторая $T+H$ последовательность с индексами $n, n+1, n+1, n+2$. Тогда первый существенный многочлен $R_1(z) = \alpha_0 + \alpha_1 z + \dots + \alpha_m z^m$ этой последовательности имеет отличный от нуля коэффициент α_d тогда и только тогда, когда матрица $S_{n+1,d+1}(a_{n-m+1}^{n+2m})$, полученная из $S_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m})$ вычеркиванием $(d+1)$ -го столбца, обратима. Пусть это условие выполнено. Пронормируем $R_1(z)$ таким образом, чтобы $\alpha_d = 1$. Полученный многочлен будем называть d -нормированным. Тогда матрица

$$P_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m}) = \begin{pmatrix} 0 & \dots & \alpha_0 & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \alpha_1 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & \alpha_m & \dots & 0 \end{pmatrix},$$

где отличен от нуля лишь столбец с номером $d+1$, является матрицей проектора на $\ker S_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m})$. При этом $P_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m}) = I_{m+1} - S_{n+1}^\dagger(a_{n-m+1}^{n+2m})S_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m})$.

Здесь $S_{n+1}^\dagger(a_{n-m+1}^{n+2m})$ – правосторонняя обратная к $S_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m})$, полученная из матрицы $S_{n+1,d+1}^{-1}(a_{n-m+1}^{n+2m})$ добавлением нулевой строки на место с номером $d+1$.

Доказательство этой леммы незначительно отличается от доказательства аналогичного факта, приведенного в [6], и потому опущено.

Предложение 4.2. Если для индексов $T + H$ последовательности a_{n-m+1}^{n+2m} , возникающей в задаче нахождения знаменателя линейной аппроксимации Паде–Чебышева типа (n,m) , выполняется условие $\mu_4 - \mu_1 \leq 2$, то знаменатель линейной аппроксимации Паде–Чебышева является устойчивым.

Доказательство. Докажем вначале близость первых существенных многочленов $R_l(z)$ и $\tilde{R}_l(z)$ последовательностей a_{n-m+1}^{n+2m} и \tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m} .

По d -нормированному первому существенному многочлену $R_l(z)$ составим проектор $P_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m})$ на ядро матрицы $S_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m})$. В силу близости a_0^{n+2m} и \tilde{a}_0^{n+2m} последовательностей матрицы $S_{n+1,d+1}(a_{n-m+1}^{n+2m})$, $S_{n+1,d+1}(\tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m})$ из леммы 4.2 будут достаточно близки, значит матрица $S_{n+1,d+1}(\tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m})$ будет также обратима и, следовательно, многочлен $\tilde{R}_l(z)$ будет также иметь не-нулевой коэффициент $\tilde{\alpha}_d$.

Применим теперь лемму 4.1.

Положим $A = S_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m})$, $B = S_{n+1}(\tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m})$ и $A^\dagger = S_{n+1}^\dagger(a_{n-m+1}^{n+2m})$. Тогда $P_A = P_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m})$. Очевидно, что $\|S_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m})\| \leq 2\|a_{n-m+1}^{n+2m}\| \leq 2\|a_0^{n+2m}\|$. Тогда

$\|S_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m} - \tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m})\| \leq 2\|a_0^{n+2m} - \tilde{a}_0^{n+2m}\|$ и при достаточно малых возмущениях условие $\|A - B\| < \frac{1}{2\|A^\dagger\|}$ леммы 4.1. выполнено.

Докажем, что проектор P_B , построенный в этой лемме, совпадает с $P_{n+1}(\tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m})$. Для этого уточним структуру матриц C и C^{-1} .

Так как $C = I_{m+1} - S_{n+1}^\dagger(a_{n-m+1}^{n+2m})S_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m} - \tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m})$, то, поскольку $[S_{n+1}^\dagger(a_{n-m+1}^{n+2m})]_{d+1}$ – нулевая строка, получаем, что $(d+1)$ -я строка матрицы C имеет вид $[C]_{d+1} = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$. Ясно, что

тот же вид имеет $(d+1)$ -я строка матрицы $C^{-1} = I_{m+1} + \sum_{j=1}^{\infty} (S_{n+1}^\dagger(a_{n-m+1}^{n+2m})S_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m} - \tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m}))^j$.

$$\begin{pmatrix} 0 & \dots & * & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 1 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

$$\text{Но тогда } P_B = C^{-1}P_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m})C = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & * & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

Здесь только $(d+1)$ -й столбец является ненулевым и стоит в $(d+1)$ -й строке.

Так как P_B – проектор на $\ker S_{n+1}(\tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m})$, то его $(d+1)$ -й столбец принадлежит $\ker S_{n+1}(\tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m})$, то есть совпадает с d -нормированным многочленом $\tilde{R}_l(z)$. Это означает, что $P_B = P_{n+1}(\tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m})$.

Тогда получаем, что

$$\begin{aligned}\|R_l(z) - \tilde{R}_l(z)\| &= \|P_{n+1}(\tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m}) - P_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m})\| \leq \\ \text{const} \|S_{n+1}(a_{n-m+1}^{n+2m}) - S_{n+1}(\tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m})\| &\leq \text{const} \|a_0^{n+2m} - \tilde{a}_0^{n+2m}\|.\end{aligned}$$

Близость первых существенных многочленов последовательностей a_{n-m+1}^{n+2m} и \tilde{a}_{n-m+1}^{n+2m} доказана. Построим по многочленам $R_l(z)$, $\tilde{R}_l(z)$, а точнее по их коэффициентам R_{l_i} , \tilde{R}_{l_i} (см. (5)), знаменатели $Q(z) \equiv Q_0(z)$ и $\tilde{Q}(z) \equiv \tilde{Q}_0(z)$. Покажем, что и они будут близки.

Действительно,

$$\|Q(z) - \tilde{Q}(z)\| = \left\| \sum_{i=0}^m 2(R_{l_i} - \tilde{R}_{l_i})T_i(z) \right\| = 2\|R_l(z) - \tilde{R}_l(z)\| \leq \text{const} \|a_0^{n+2m} - \tilde{a}_0^{n+2m}\|. \quad (10)$$

Предложение доказано.

Предложение 4.3. Если для индексов $T + H$ последовательности a_{n-m+1}^{n+2m} , возникающей в задаче нахождения знаменателя линейной аппроксимации Паде–Чебышева типа (n, m) , выполняется условие $\mu_4 - \mu_1 \leq 2$, то числитель линейной аппроксимации Паде–Чебышева является устойчивым.

Доказательство. Числители P, \tilde{P} получаются с помощью умножения векторов, составленных из коэффициентов знаменателей Q, \tilde{Q} на матрицы M, \tilde{M} (см. (4)). Легко видеть, что $\|M - \tilde{M}\| \leq 3\|a_0^{n+2m} - \tilde{a}_0^{n+2m}\|$.

$$\text{Тогда } \|P - \tilde{P}\| = \|MQ - \tilde{M}\tilde{Q}\| = \|MQ - M\tilde{Q} + M\tilde{Q} - \tilde{M}\tilde{Q}\| \leq \|M\|\|Q - \tilde{Q}\| + \|\tilde{Q}\|\|M - \tilde{M}\|.$$

В силу (10) имеем $\|\tilde{Q}\| \leq \|Q\| + \|\tilde{Q} - Q\| \leq \|Q\| + \text{const} \|a_0^{n+2m} - \tilde{a}_0^{n+2m}\|$ и, при достаточно малом возмущении последовательности a_0^{n+2m} , получаем $\|\tilde{Q}\| < \frac{3}{2}\|Q\|$.

$$\text{Тогда } \|P - \tilde{P}\| \leq \text{const} \|M\| \|a_0^{n+2m} - \tilde{a}_0^{n+2m}\| + \frac{9}{2}\|Q\| \|a_0^{n+2m} - \tilde{a}_0^{n+2m}\| = \text{const} \|a_0^{n+2m} - \tilde{a}_0^{n+2m}\|.$$

Теперь мы можем доказать и устойчивость самих аппроксимаций.

$$\text{Оценим } \left\| \frac{P}{Q} - \frac{\tilde{P}}{\tilde{Q}} \right\| = \left\| \frac{P\tilde{Q} - Q\tilde{P}}{Q\tilde{Q}} \right\| = \left\| \frac{P\tilde{Q} - PQ + PQ - Q\tilde{P}}{Q\tilde{Q}} \right\| \leq \frac{\|P\|}{\|Q\|\|\tilde{Q}\|} \|\tilde{Q} - Q\| + \frac{\|P - \tilde{P}\|}{\|\tilde{Q}\|}.$$

В силу (10), при достаточно малых возмущениях последовательности a_0^{n+2m} , имеем

$$\frac{1}{\|\tilde{Q}\|} \leq \frac{1}{\|Q\| - \|\tilde{Q} - Q\|} \leq \frac{1}{\|Q\| - \text{const} \|a_0^{n+2m} - \tilde{a}_0^{n+2m}\|} < \frac{2}{\|Q\|}.$$

$$\text{Тогда } \left\| \frac{P}{Q} - \frac{\tilde{P}}{\tilde{Q}} \right\| < \frac{2\|P\|}{\|Q\|^2} \|\tilde{Q} - Q\| + \frac{2\|P - \tilde{P}\|}{\|Q\|} \leq \text{const} \|a_0^{n+2m} - \tilde{a}_0^{n+2m}\|.$$

Теперь теорема 4.1 полностью доказана.

Заключение

В статье получено достаточное условие существования, единственности и устойчивости решения задачи линейной аппроксимации Паде–Чебышева в терминах существенных индексов $T + H$ последовательности.

Работа выполнена при поддержке РФФИ-Урал, грант № 04-01-96006. О.Л. Ибряева также благодарит за финансовую поддержку Министерство образования и Правительство Челябинской области, грант № 003.01.06-04.БМ.

Литература

1. Adukov V.M. Generalized Inversion of Block Toeplitz Matrices// Linear Algebra and Its Applications. – 1998. – V. 274. – P. 85–124.
2. Адуков В.М., Ибряева О.Л. О структуре ядра теплиц-плюс-ганкелевых матриц // Вестник ЮУрГУ, Серия «Математика, физика, химия». – 2001. – № 7. – С. 3–12.
3. Ибряева О.Л. Достаточное условие единственности линейной аппроксимации Паде–Чебышева // Известия Челябинского научного центра. – 2002. – Вып. 4(17) – С. 1–5.
4. Heinig G., Jankowski P. Kernel structure of Block Hankel and Toeplitz Matrices and Partial Realization// Linear Algebra and Its Applications. – 1992. – V. 175. – C. 1–30.
5. Litvinchuk G.S., Spitkovski I.M. Factorization of measurable matrix functions. – Berlin.: Akademie-Verlag, 1987. – 372 p.
6. Adukov V.M. The uniform convergence of subsequences of the last intermediate row of the Padé table // J. Approx. Theory. – 1997. – V. 88. – P. 354–369.

Поступила в редакцию 20 сентября 2004 г.

О НЕКОТОРЫХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЯХ НАПРЯЖЕННОГО СОСТОЯНИЯ ПЛАСТИЧЕСКОЙ СРЕДЫ ПРИ ОСЕСИММЕТРИЧНОЙ ДЕФОРМАЦИИ

В.Л. Дильман

В работе при некоторых допущениях получены приближенные математические модели напряженного состояния поперечной пластически деформируемой мягкой прослойки цилиндрического образца, в форме краевых задач для систем уравнений гиперболического типа, в том числе с постоянными на характеристиках римановыми инвариантами, что позволяет перенести метод характеристик на некоторые случаи осесимметричной деформации неоднородных сред.

1. Введение. Задачи, приводящие к осесимметричному напряженно-деформированному состоянию (НДС), возникают при экспериментальном исследовании свойств материалов (растяжение и сжатие стержневых цилиндрических образцов, деформирование под действием осевой силы и внутреннего давления трубчатых образцов), при изучении НДС поперечных прослоек (мягких и твердых) в таких образцах и при исследовании шейки. Известные точные решения [1, 2] относятся к гипотетическим состояниям и практически бесполезны в реально возникающих задачах. Попытки получения приближенных решений [3–5] основаны на использовании упрощающих условий и допущений (нередко противоречащих друг другу [5]) инженерного характера и не содержат анализа допускаемых ошибок. Существенной трудностью исследования осесимметричного НДС является негиперболичность соответствующей системы уравнений [1]. Однако и в ряде частных случаев, когда система уравнений гиперболична, инварианты Римана не постоянны на характеристиках, а их дифференциалы вдоль последних зависят от искомых функций, что не позволяет получить метод характеристик, аналогичный методу решения плоских задач теории пластичности [6]. Один из путей преодоления указанной трудности – замена системы уравнений НДС пластической среды на приближенную на основе некоторых физических гипотез, соответствующих изучаемой ситуации, и математического анализа априорных свойств решений.

В работе рассматривается НДС мягкой поперечной прослойки в сплошном цилиндрическом образце под осевой нагрузкой. Цель работы – получение и исследование упрощенных систем уравнений пластического равновесия материала прослойки и материала твердой части образца вблизи прослойки. На основе этого исследования можно судить о развитии напряженного состояния в прослойке и прилежащих к ней участках с ростом нагрузки вплоть до потери несущей способности образца.

В работе под прослойкой понимается участок цилиндрического образца, расположенный между двумя ортогональными осями образца плоскостями. Предполагается, что материал прослойки (Π) и основной металл (ΩM) образца идеально упругопластичный с идентичными упругими свойствами, но разными пределами текучести: k^{Π} и $k^{\Omega M}$ соответственно, $k^{\Pi} < k^{\Omega M}$, причем выполняются обычные в таких случаях допущения [6]. $K = k^{\Pi} / k^{\Omega M}$, коэффициент механической неоднородности, полагается ненамного большим единицы ($K = 1,05 \dots 1,50$). Такой диапазон значений K наиболее характерен для сварных соединений. В качестве уравнения пластичности принято условие Мизеса. Полученные результаты переносятся на упрочняемые материалы (с изотропным упрочнением) заменой в условии полной пластичности пределов текучести на пластические постоянные, характеризующие моменты потери пластической устойчивости металлом слоя и основным металлом [7].

2. Гипотеза плоских сечений. НДС пластической среды, как известно [1; 6], при осесимметричной деформации определяется в предположениях теории течения системой уравнений

$$\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial z} + \frac{\sigma_r - \sigma_\phi}{r} = 0; \quad (1)$$

$$\frac{\partial \tau_{rz}}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} + \frac{\tau_{rz}}{r} = 0; \quad (2)$$

$$(\sigma_r - \sigma_\phi)^2 + (\sigma_\phi - \sigma_z)^2 + (\sigma_z - \sigma_r)^2 + 6\tau_{rz}^2 = 6; \quad (3)$$

$$\frac{\frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{v_r}{r}}{\sigma_r - \sigma_\phi} = \frac{\frac{\partial v_z}{\partial z} - \frac{\partial v_r}{\partial r}}{\sigma_z - \sigma_r} = \frac{\frac{\partial v_r}{\partial z} + \frac{\partial v_z}{\partial r}}{2\tau_{rz}}; \quad (4)$$

$$\frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_r}{r} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0. \quad (5)$$

Здесь под σ_r , σ_ϕ , σ_z и τ_{rz} понимаются безразмерные аналоги радиального, кольцевого, осевого нормальных напряжений и радиально-осевого касательного напряжения, полученные из соответствующих напряжений делением на предел текучести; v_r , v_ϕ и v_z – условные скорости перемещений (определяются с точностью до постоянного множителя). Система (1)–(5) содержит шесть независимых уравнений относительно шести неизвестных и, в этом смысле, замкнута. Рассматривая прослойку, носителем этой системы считаем прямоугольник ABB_1A_1 : $r \in [-1;1]$, $z \in [\chi; \chi]$, – осевое сечение прослойки. Здесь χ – относительная толщина прослойки, то есть отношение ее толщины к диаметру. Сторона AA_1 пусть лежит на свободной поверхности, AB – на контактной, BB_1 – на другой свободной поверхности.

Помимо очевидных граничных условий

$$\sigma_r(1, z) = 0, \tau_{rz}(1, z) = 0, \tau_{rz}(0, z) = 0, \tau_{rz}(r, 0) = 0 \quad (6)$$

(считаем внешнее давление отсутствующим), можно еще найти (в принципе, как функцию достигнутой внешней нагрузки) наибольшее на контактной поверхности $z = \chi$ значение α ($0 < \alpha \leq 1$) касательных напряжений в каждый момент нагружения:

$$\max |\tau_{rz}| = \alpha, r \in [0; 1], \quad (7)$$

Фактически α характеризует отклонение напряженного состояния прослойки от простого под действием внешней нагрузки и, тем самым, уровень достигнутой внешней нагрузки. Его максимальное значение α^* определяется НДС всего соединения, в том числе тем, произойдет ли вовлечение ОМ в пластическое деформирование, и зависит количественно от коэффициента механической неоднородности K . Границных условий (6) и (7) недостаточно для однозначного решения системы (1)–(5), поэтому необходимо привлечение дополнительных гипотез, предугадывающих внутреннее состояние материала. Для не очень толстой мягкой прослойки ($\chi = 0,1 \dots 0,7$), в силу сдерживающего влияния ОМ, можно предположить, что в каждой точке прослойки скорость перемещения в направлении оси образца не зависит от расстояния до оси:

$$v_z = W(z), \quad (8)$$

где W – неизвестная функция одной переменной. Это предположение назовем гипотезой плоских сечений (ГПС).

Лемма 1. Равносильны утверждения:

1) Выполняется ГПС;

2) $\xi_r = \xi_\phi$;

3) $\sigma_r = \sigma_\phi$.

Здесь $\xi_r = \frac{\partial v_r}{\partial r}$, $\xi_\phi = \frac{v_r}{r}$ – радиальные и кольцевые скорости деформации. Из леммы 1 легко следует

Лемма 2. При выполнении ГПС система (1)–(5) приобретает вид (знак плюс в уравнении (11) соответствует растяжению, знак минус – сжатию):

$$\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{\partial \tau_{rz}}{\partial z} = 0; \quad (9)$$

$$\frac{\partial \tau_{rz}}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_z}{\partial z} = -\frac{\tau_{rz}}{r}; \quad (10)$$

$$\sigma_z - \sigma_r = \pm \sqrt{3} \sqrt{1 - \tau_{rz}^2}; \quad (11)$$

$$\frac{3W'(z)}{\sigma_z - \sigma_r} = -\frac{rW''(z)}{2\tau_{rz}}; \quad (12)$$

$$v_r = -rW'(z)/2. \quad (13)$$

Система уравнений (9)–(13) является математической моделью НДС пластической прослойки при осесимметрической деформации и гипотезе плоских сечений (8).

Следствия. 1. При выполнении ГПС задача становится квазистатически определимой, так как система (9)–(11) содержит три уравнения относительно трех неизвестных напряжений, то есть замкнута в напряжениях.

2. При выполнении ГПС система (9)–(13), и поэтому система (1)–(5), имеют гиперболический тип. Действительно, система (9)–(11) сводится к системе из двух уравнений (рассматривается случай растяжения)

$$\frac{\partial \sigma_r}{\partial r} + \frac{\partial \tau}{\partial z} = 0; \quad (14)$$

$$\frac{\partial \tau}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_r}{\partial z} - \frac{\sqrt{3}\tau}{\sqrt{1-\tau^2}} \frac{\partial \tau}{\partial z} = -\frac{\tau_{rz}}{r}; \quad (15)$$

причем собственные числа матрицы этой системы действительны и различны.

3. Система (14), (15) не является однородной относительно частных производных, поэтому инварианты Римана [8] не постоянны вдоль характеристик. Это обстоятельство требует дальнейшего упрощения системы уравнений пластического равновесия (14), (15).

3. Моделирование однородной системы уравнений пластического равновесия. Введем обозначение $Z(z) = -\sqrt{3}W''(z)(6W'(z))^{-1}$. Из (12) и (11) следует

$$\tau_{rz} = t/\sqrt{1+t^2}, \quad t = tZ(z). \quad (16)$$

Если в разложении

$$t/\sqrt{1+t^2} = t - t^3/2 + 3t^5/8 - \dots |t| < 1$$

ограничиться только первым членом, ошибка в формуле

$$\tau_{rz} = t = rZ(z). \quad (17)$$

составит, например, при $\alpha = 1/4$ около 3 %. При больших значениях α лучше зависимость (16) аппроксимировать степенной функцией

$$\tau_{rz} = bt^\alpha = br^\alpha Z^\alpha(z), \quad 0 < \alpha < 1. \quad (18)$$

Временно обозначим

$$f(t) = t/\sqrt{1-t^2}, \quad g(t) = bt^\alpha. \quad (19)$$

Так как наибольшая точность аппроксимации требуется в окрестности свободной поверхности прослойки, где функцию $f(t)$, в силу (19), (16) и (7), принимает значение α , как нетрудно подсчитать, при значении аргумента $t = \beta = \alpha(1-\alpha^2)^{-0.5}$, для нахождения параметров a и b функции $g(t)$ (19), положим $f(\beta) = g(\beta)$, $f'(\beta) = g'(\beta)$. Решая эту систему, получаем

$$a = 1 - \alpha^2, \quad b = \sqrt{1 - \alpha^2} \left(\alpha / \sqrt{1 - \alpha^2} \right)^{\alpha^2}. \quad (20)$$

Заметим, что при аппроксимации касательных напряжений τ_{rz} по формулам (17) и (18)

$$\frac{\partial \tau_{rz}}{\partial r} = a \frac{\tau}{r}, \quad (21)$$

причем $a = 1$ в случае (17). Заменив правую часть в (15) по формуле (21), получим в качестве приближенной математической модели напряженного состояния пластичной прослойки систему, состоящую из уравнения (14) и уравнения

$$\frac{a+1}{a} \frac{\partial \tau}{\partial r} + \frac{\partial \sigma_r}{\partial r} - \frac{\sqrt{3} \tau}{\sqrt{1-\tau^2}} \frac{\partial \tau}{\partial z} = 0. \quad (22)$$

В нормальной матричной форме система (14), (22) имеет вид

$$\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial r} + A \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial z} = \bar{0}, \quad (23)$$

где $\bar{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_r \\ \tau \end{pmatrix}$, $A = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ \frac{a}{a+1} & -\frac{\sqrt{3} a \tau}{(a+1)\sqrt{1-\tau^2}} \end{pmatrix}$, $\bar{0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$, и является упрощенной приближенной математической моделью для напряженного состояния пластического слоя в случае осесимметричной деформации. Собственные числа матрицы A вычисляются по формулам

$$\lambda_{1,2} = \frac{-\sqrt{3} a \tau \pm \sqrt{4a(a+1) - a(a+4)\tau^2}}{2(a+1)\sqrt{1-\tau^2}}. \quad (24)$$

При $a=1$

$$\lambda_{1,2} = \frac{-\sqrt{3}\tau \pm \sqrt{8-5\tau^2}}{4\sqrt{1-\tau^2}}.$$

Уравнения характеристик имеют вид

$$\frac{dz}{dr} = \lambda_i, \quad i=1,2, \quad (25)$$

со знаком плюс в (24) – ξ -характеристики (пусть это будет λ_1), со знаком минус – η -характеристики. Угол γ наклона ξ -характеристики к оси Or зависит от значения τ в точке вычисления: $\operatorname{tg} \gamma = \lambda_1$.

Собственные векторы, соответствующие собственным значениям (24), имеют вид $\bar{l}_i = (1; \lambda_i)$, $i=1,2$. В характеристической форме [8] система (23) записывается в виде

$$\bar{l}_i \left(\frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial r} + \lambda_i \frac{\partial \bar{\sigma}}{\partial z} \right) = 0, \quad i=1,2,$$

а в инвариантной форме [8]

$$\frac{\partial I_i}{\partial r} + \lambda_i \frac{\partial I_i}{\partial z} = 0, \quad i=1,2, \quad (26)$$

$$I_i = \sigma_r + \mu_i, \quad i=1,2, \quad (27)$$

где $\mu_i = \mu_i(\tau)$ – произвольная первообразная функции λ_i , ($i=1,2$). На характеристиках уравнения (26) записутся в виде

$$\frac{dI_i}{dr} = 0, \quad i=1,2,$$

где дифференцирование ведется в направлении характеристик. Следовательно, инвариантны Римана I_i (27) постоянны на характеристиках:

$$I_i = \sigma_r + \mu_i = \text{const}, \quad i=1,2. \quad (28)$$

Можно считать, в силу (24),

$$\begin{aligned} \mu_i &= -\frac{\sqrt{3}}{2(a+1)} \int_0^\tau \frac{\tau d\tau}{\sqrt{1-\tau^2}} \pm \sqrt{\frac{a}{a+1}} \int_0^\tau \frac{\sqrt{1-\frac{a+4}{4(a+1)}\tau^2}}{\sqrt{1-\tau^2}} d\tau = \\ &= \frac{\sqrt{3}}{2(a+1)} \left(\sqrt{1-\tau^2} - 1 \right) \pm \sqrt{\frac{a}{a+1}} E \left(\arcsin \tau; \sqrt{\frac{a+4}{4(a+1)}} \right), \end{aligned} \quad (29)$$

где через $E(\varphi; m)$ обозначен эллиптический интеграл второго рода [9]. Здесь $\varphi = \arcsin \tau$, $m = 0,5\sqrt{(a+4)/(a+1)}$.

Пусть CA и CA_1 – ξ - и η -характеристики, выходящие на свободную поверхность AA_1 в угловых точках сечения прослойки A и A_1 ; C – точка их пересечения. По условию (6), $\sigma_r = 0$ и $\tau_{rz} = 0$ на поверхности AA_1 , поэтому для любой точки D внутри или на границе треугольника ACA_1 , в силу (28),

$$\sigma_r(D) + \mu_i(D) = 0, \quad i = 1, 2.$$

Из (29) легко вывести, что $\tau(D) = 0$ и $\sigma_r(D) = 0$; тогда по (11), $\sigma_z(D) = \sqrt{3}$. Таким образом, в треугольнике ACA_1 реализуется равномерное напряженное состояние, причем в этом треугольнике, в силу (24), $\lambda_{1,2} = \sqrt{a/(a+1)}$, а уравнения характеристик (25) имеют вид

$$\frac{dz}{dr} = \pm \sqrt{a/(a+1)},$$

откуда

$$z = \pm \sqrt{a/(a+1)} r + c$$

(плюс у ξ -характеристик). В частности, расстояние от точки C – вершины треугольника равномерного напряженного состояния, – до свободной поверхности AA_1 равно $\sqrt{(a+1)/a} \chi$, а угол наклона ξ -характеристики в треугольнике ACA_1

$$\gamma = \operatorname{arctg} \sqrt{a/(a+1)}.$$

4. Случай малых касательных напряжений. При значениях α порядка нескольких десятых можно найти несложные приближенные аналитические выражения для функций v_i , и, как следствие, для напряжений и уравнений характеристик. Используя разложение в степенной ряд степени бинома [9], получаем по формуле (29)

$$\mu_i \approx \pm \sqrt{\frac{a}{a+1}} \tau - \frac{\sqrt{3}}{4(a+1)} \tau^2$$

причем относительная ошибка в этом приближенном равенстве оценивается величиной $0,125a(a+1)^{-1}\tau^2$ и при $a=1$ и $\alpha \leq 0,3$ имеет порядок 0,6 %, а при $\alpha \leq 0,5$ – около 1,5 % (при $a < 1$ погрешность еще меньше). Вдоль характеристик инварианты Римана постоянны и имеют вид

$$\sigma_r \pm \sqrt{\frac{a}{a+1}} \tau - \frac{\sqrt{3}}{4(a+1)} \tau^2 = \text{const}.$$

Отсюда следует, что во всех точках η -характеристики, выходящей на свободную поверхность,

$$\sigma_r \approx \sqrt{\frac{a}{a+1}} \tau + \frac{\sqrt{3}}{4(a+1)} \tau^2, \quad \sigma_z \approx \sqrt{\frac{a}{a+1}} \tau - \frac{\sqrt{3}(2a+1)}{4(a+1)} \tau^2 + \sqrt{3}. \quad (30)$$

Аналогично выводятся приближенные уравнения характеристик (плюс соответствует ξ -характеристикам)

$$\frac{dz}{dr} = \pm \sqrt{\frac{a}{a+1}} - \frac{\sqrt{3}a}{2(a+1)} \tau \pm \sqrt{\frac{a}{a+1}} \frac{3a}{8(a+1)} \tau^2 - \frac{\sqrt{3}a}{4(a+1)} \tau^3 + \dots.$$

С ростом осевой нагрузки растут касательные напряжения в прослойке. В момент потери пластической устойчивости [7] параметр α достигает своего наибольшего значения α^* . Если OM вблизи прослойки вовлекается в пластическую деформацию, зависимость (30) позволяет, с помощью методики [10], вычислить α^* как функцию от K . Опуская промежуточные выкладки, приведем результат для случая $a=1$ аппроксимация касательных напряжений формулой (17):

$$\alpha^* = \sqrt{\frac{3}{2}}(K-1) \left(1 + \frac{9}{16} \frac{(K-1)^2}{K} \right)$$

или, при малых $K - 1$, $\alpha^* \approx 1,22(K - 1)$. При часто встречающихся в сварных соединениях значениях механической неоднородности $K \leq 1,2$ ошибка в последней формуле не более 2 %. Знание α^* позволяет [11] однозначно определить τ_{rz} в форме (16) решением системы уравнений (9)–(11) (в [11] соответствующая методика применялась в случае кольцевой прослойки в составе трубчатого образца).

Литература

1. Хилл Р. Математическая теория пластичности. – М.: Гостехиздат. – 1956. – 407 с.
2. Аннин Б.А., Бытев В.О., Сенашов С.И. Групповые свойства уравнений упругости и пластичности. – Новосибирск: Наука. – 1985. – 140 с.
3. Бриджен П. Исследование больших пластических деформаций и разрыва. – М.: Иностранная литература. – 1955. – 444 с.
4. Давиденков Н.Н., Спиридо́нова Н.И. Анализ напряженного состояния в шейке растянутого образца// Заводская лаборатория. – 1945. – № 6. – С. 583–593.
5. Бакши О.А., Качанов Л.М. О напряженном состоянии пластичной прослойки при осесимметрической деформации// Изв. АН СССР. Механика. – 1965. – № 2. – С. 134–137.
6. Ивлев Д.Д. Теория идеальной пластичности. – М.: Наука. – 1966. – 231 с.
7. Дильман В.Л. Потеря пластической устойчивости тонкостенной цилиндрической оболочки в предположениях теории течения// Обзорение прикл. и промышл. математики. – 2001. – Т. 8. – Вып. 1. – С. 158–159.
8. Рождественский Б.Л., Яненко Н.Н. Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике. – М.: Наука. – 1978. – 688 с.
9. Двайт Г.Б. Таблицы интегралов и другие математические формулы. – М.: Наука. – 1973. – 228 с.
10. Дильман В.Л., Остсемин А.А. Анализ методом линий скольжения вязкой прочности сварного соединения с подрезом прямошовных труб большого диаметра// Пробл. прочности. – 2004. – № 3. – С. 72–82.
11. Дильман В.Л., Остсемин А.А. О напряженно-деформированном состоянии пластического кольца при растяжении// Изв. РАН. Механика твердого тела. – 2002. – № 2. – С. 109–120.

Поступила в редакцию 1 декабря 2004 г.

ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ПРИКЛАДНОЙ БИОФИЗИКИ. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

С.В. Ермаков, В.И. Заляпин

В работе отражены результаты численного исследования системы нелинейных интегральных уравнений Вольтерра первого рода. Прямой условной регуляризацией получено решение системы, восстанавливающее динамику радионуклидов в организме человека с течением времени по современным измерениям содержания ^{90}Sr в эмали зубов. Работа поддержана грантом РФФИ-УРАЛ 04-01-96073.

Известно, что в результате техногенных катастроф, а также отсутствия надежных технологий переработки и храненияadioактивных отходов, как среда обитания (бассейн реки Теча, Челябинская область), так и жители прибрежных населенных пунктов подверглись радиоактивному загрязнению – внешнему (за счет повышенного вблизи реки гамма-фона) и внутреннему (от смеси радионуклидов, поступающих в организм с водой и продуктами питания местного производства) облучению [1]. Основной вклад в дозу внутреннего облучения вносит ^{90}Sr . Знание уровней и динамики его поступления, позволяет рассчитать накопленную дозу облучения на органы и ткани. Традиционно [2, 3] для восстановления динамики поступления ^{90}Sr используются результаты прижизненных измерений его содержания в эмали передних зубов у лиц, проживавших весь период сбросов на загрязненной территории, и в местах, где река была основным источником питьевой воды.

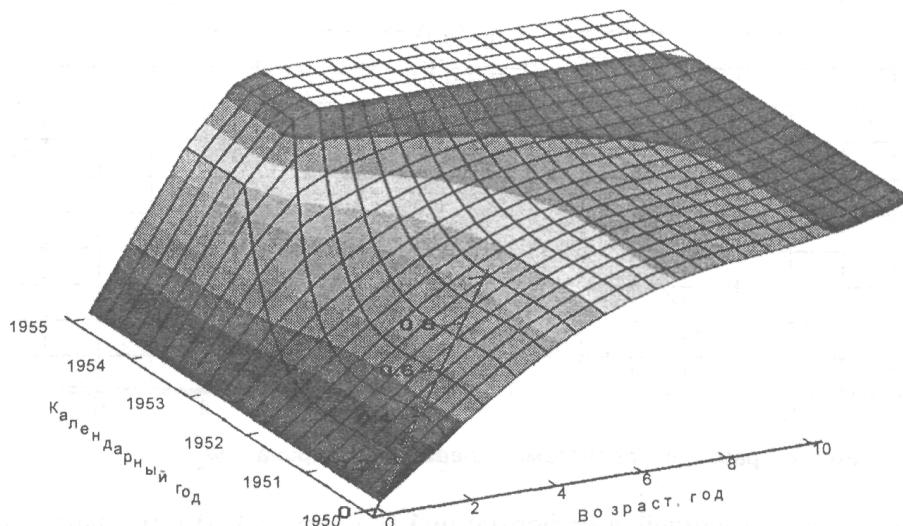
Анализ основных биологических и физических закономерностей динамики процесса вывода радионуклидов из организма человека позволил установить [4, 5], что задача нахождения функций $u_1(t)$ – коэффициента перехода ^{90}Sr из желудочно-кишечного тракта в эмаль передних зубов, и $u_2(t)$ – модифицированной скорости поступления ^{90}Sr в момент времени t , при некоторых дополнительных предположениях, может быть сведена к задаче решения системы интегральных уравнений:

$$\begin{cases} \int\limits_0^s \alpha(t-s+10, t) u_1(t-s+10) u_2(t) dt = \varphi_1(s), & 0 \leq s \leq 10 \\ \int\limits_0^s \alpha(t, t-s+10) u_1(t) u_2(t-s+10) dt = \varphi_2(s), & 0 \leq s \leq 10 \\ u_1(0) = 1, \end{cases} \quad (1)$$

где правая часть системы, векторная функция $\Phi = \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \end{pmatrix}$, описывает прижизненные модифицированные измерения зубного датчика, а ядро – $\alpha(t, \tau)$ получено в результате экспериментального оценивания определенных биофизических процедур и имеет вид, изображенный на рис. 1.

Примененные в работах [4, 5] соображения – линеаризация с последующей регуляризацией методом невязки получающейся системы линейных интегральных уравнений, позволили получить предварительные результаты в рассматриваемой задаче.

Однако значительный интерес представляет прямое решение поставленной задачи с одновременным исследованием вопроса о необходимости регуляризации – известно (например [6]), что для скалярных уравнений Вольтерра наблюдается так называемая «саморегуляризация» численных процедур, обусловленная диагональной структурой уравнения и реализуемая за счет специального выбора шага дискретизации.

Рис. 1. Рельеф поверхности $\alpha(t, \tau)$ **1. Модельная система**

Рассмотрим $u^0(t) = \begin{pmatrix} u_1^0(t) \\ u_2^0(t) \end{pmatrix}$ – пробную функцию, качественно воспроизводящую характерные особенности решения системы (1) в соответствии с соображениями, приведенными в [4], и рассмотрим модельную систему

$$\left\{ \begin{array}{l} \int_0^s \alpha(t-s+10, t) u_1^0(t-s+10) u_2^0(t) dt = \varphi_1^0(s), \quad 0 \leq s \leq 10 \\ \int_0^s \alpha(t, t-s+10) u_1^0(t) u_2^0(t-s+10) dt = \varphi_2^0(s), \quad 0 \leq s \leq 10 \\ u_1^0(0) = 1, \end{array} \right. \quad (2)$$

правые части которой получены подстановкой пробной функции $u^0(t)$ в систему (1).

В качестве пробных функций были взяты функции

$$u_1^0(t) = e^{-t}, \quad u_2^0(t) = \frac{4000}{1+t^3},$$

воспроизводящие характерные особенности поведения настоящих решений системы (1).

Соответствующие правые части приведены на рис. 2.

Полученная система анализировалась следующими вычислительными процедурами:

- нелинейная система уравнений, полученная из (2) дискретизацией интегральных соотношений, решалась итерационным методом Ньютона–Рафсона;
- квазирешение системы (2) отыскивалось методом наименьших квадратов с исследованием системы необходимых условий итерационным методом Ньютона–Рафсона;
- квазирешение системы отыскивалось МНК. При этом был реализован алгоритм прямого поиска экстремума (метод Хука–Дживса, градиентные методы);
- для решения системы использовался алгоритм регуляризации методом невязки. Минимизация сглаживающего функционала осуществлялась с помощью прямых процедур.

С целью исследования устойчивости вычислительных алгоритмов одновременно теми же методами решалась возмущенная система, правые части которой получались из точных правых частей случайным «зашумлением»: $\hat{\varphi}(s) = \varphi(s) + \varepsilon(s)$, $\varepsilon(s) = \begin{pmatrix} \varepsilon_1(s) \\ \varepsilon_2(s) \end{pmatrix}$. Порядок зашумления исход-

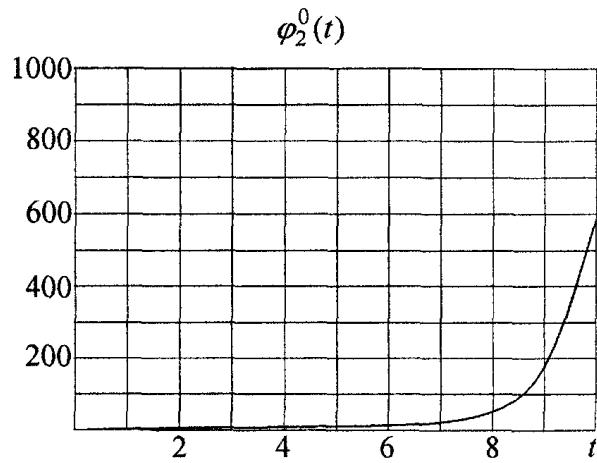
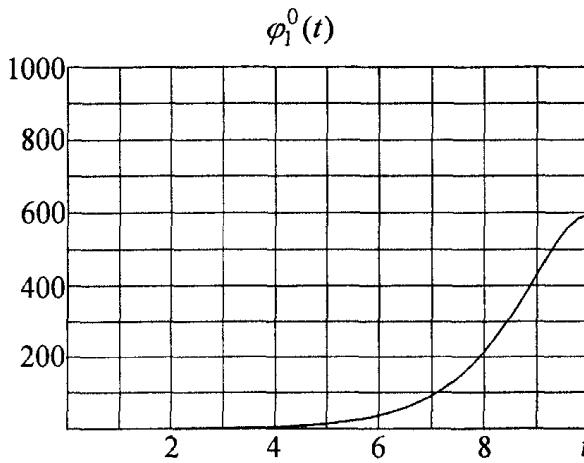


Рис. 2. Правые части системы: слева – ϕ_1^0 , справа – ϕ_2^0

ных данных, в соответствии с имеющейся информацией (например [3]) о реальных экспериментальных данных, был принят на уровне 5–10 % от измеряемого значения.

2. Дискретизация

Эффективным с вычислительной точки зрения методом дискретизации рассматриваемой системы является дискретизация, полученная кусочно-линейной аппроксимацией входящих в уравнения функций.

На промежутке $[0, 10]$ зададим равномерную сетку $0 = s_0 < s_1 < \dots < s_n = 10$, $s_i = ih$, $h = \frac{10}{n}$ и пусть $\Lambda_i(s)$, $i = 0, 1, \dots, n$ – базис Лагранжа кусочно-линейных на промежутке $[0, 10]$ функций, определяемый условиями $\Lambda_i(s_j) = \delta_{ij}$. Здесь $\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases}$ – символ Кронекера. Кусочно-линейные аппроксимации функций $u_i(t)$ в этом случае могут быть представлены в виде

$$u_i(t) = \sum_{p=0}^n u_{i,p} \Lambda_p(t), \quad u_{i,p} = u_i(ph), \quad i = 1, 2, p = 0, 1, \dots, n. \quad (3)$$

В силу равномерности разбиения, тождественно выполняется

$$\Lambda_p(t - qh) = \Lambda_{p+q}(t), \quad t \in [0, 10], \quad 0 \leq p + q \leq n.$$

Поэтому на сетке $\forall k = 0, 1, \dots, n$ при $s = s_k = kh$ получаем

$$\Lambda_i(t - s + 10) = \Lambda_i(t - s_k + s_n) = \Lambda_i(t - kh + nh) = \Lambda_{i+k-n}(t).$$

Отсюда, учитывая локальность функций Лагранжа, получаем

$$u_1(t - s + 10) = \sum_{p=n-k}^n u_{1,p} \Lambda_{p+k-n}(t) = \sum_{p=0}^k u_{1,n-k+p} \Lambda_p(t), \quad u_2(t) = \sum_{q=0}^k u_{2,q} \Lambda_q(t), \quad s = kh, \quad 0 \leq t \leq s. \quad (4)$$

Подставляя разложения (4) в систему (1)–(2), получим

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{p=0}^k \sum_{q=0}^k W_{pq}^k u_{1,n-k+p} u_{2,q} = \varphi_{1,k}; \\ \sum_{p=0}^k \sum_{q=0}^k V_{pq}^k u_1 u_{2,n-k+q} = \varphi_{2,k}; \\ k = 0, 1, \dots, n; \\ u_{1,0} = 1. \end{array} \right. \quad (5)$$

Здесь $\varphi_{i,k} = \varphi_i(s_k) = \varphi_i(kh)$, а веса W_{pq}^k , V_{pq}^k даются равенствами

$$W_{pq}^k = \int_0^{kh} \alpha(t - kh + nh, t) \Lambda_p(t) \Lambda_q(t) dt, \quad V_{pq}^k = \int_0^{kh} \alpha(t, t - kh + nh) \Lambda_p(t) \Lambda_q(t) dt.$$

Отметим некоторые особенности полученной нелинейной системы (5). Во-первых, в силу уже упомянутой выше локальности функций Лагранжа, ненулевыми будут только те веса W_{pq}^k, V_{pq}^k , для индексов которых выполняется неравенство $|p - q| \leq 1$. Во-вторых, фактически система (5) содержит $2n + 1$ уравнение относительно $2n + 1$ неизвестного – при $k = n$ уравнение первой группы тождественно совпадает с аналогичным уравнением второй группы. В-третьих, уравнения первой и второй группы, отвечающие значению $k = 0$

$$W_{00}^0 u_{1,n} u_{2,0} = \varphi_{1,0}, \quad V_{00}^0 u_{1,0} u_{2,n} = \varphi_{2,0}$$

тождественно выполняются для любых значений $u_{1,n}, u_{2,n}, u_{2,0}$ в силу $W_{00}^0 = V_{00}^0 = \varphi_{10} = \varphi_{20} = 0$. При численном исследовании системы (5) для снятия этой неопределенности использовалась априорная информация о поведении решений в концевой точке отрезка $[0, 10]$: полагалось $u_{1,n} = u_{2,n} = 0$.

3. Метод Ньютона–Рафсона

Для значений параметра дискретизации $n = 10, 25, 50, 100$ полученная выше система (5) решалась итерационным методом Ньютона с коррекцией шага итерации τ в соответствии со следующим правилом – τ полагалось равным последовательно $1 \rightarrow \frac{1}{2} \rightarrow \frac{1}{4} \rightarrow \dots \rightarrow \frac{1}{2^r} \rightarrow \dots$ до тех

пор, пока не достигалось заданное критериальное соотношение между значениями итерируемой функции на смежных шагах. Если такое значение шага не находилось (коррекция шага осуществлялась до тех пор, пока выполнялось условие $\tau > 10^{-8}$), τ полагалось равным 0.1 и алгоритм продолжал свою работу. На рис. 3–5 приведены результаты – пунктирной линией показано начальное приближение, точками – точное модельное решение, сплошной линией – расчетные значения. На всех рисунках слева изображен эскиз функции $u_1(t)$, справа – функции $u_2(t)$.

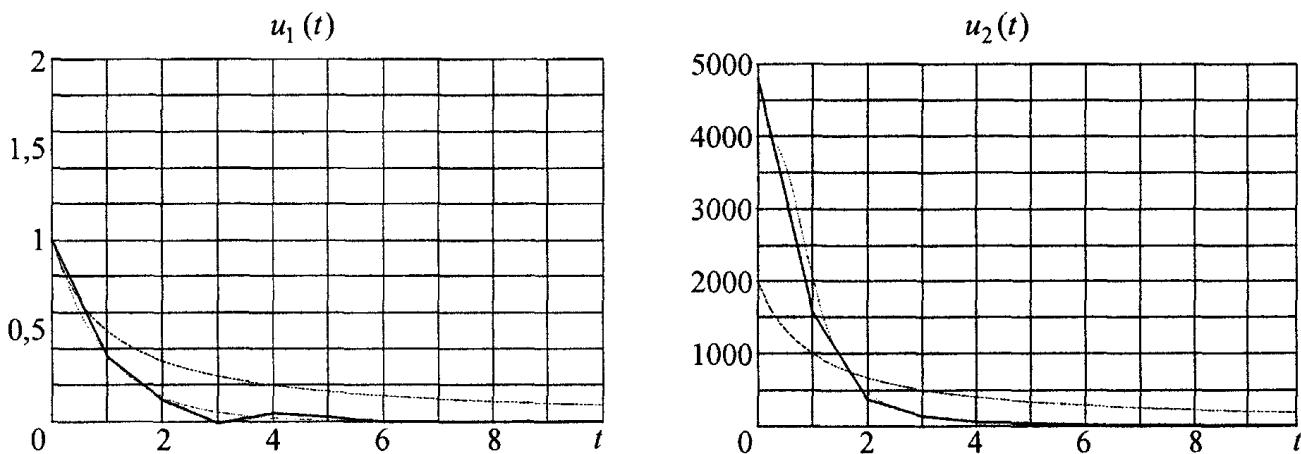


Рис. 3. Метод Ньютона–Рафсона, невозмущенные данные, $n = 10$, слева – $u_1(t)$, справа – $u_2(t)$

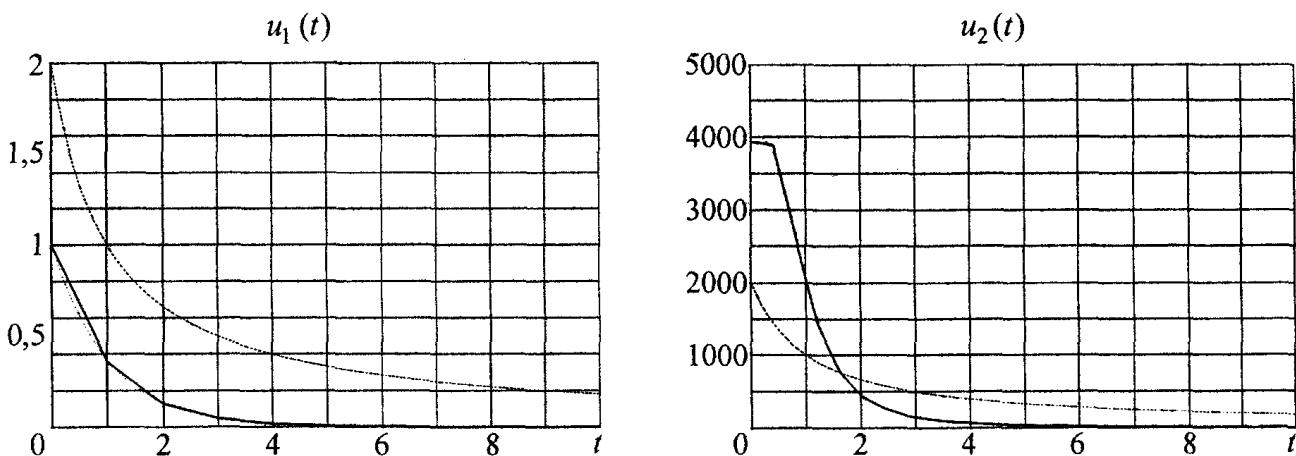


Рис. 4. Метод Ньютона–Рафсона, невозмущенные данные, $n = 50$, слева – $u_1(t)$, справа – $u_2(t)$

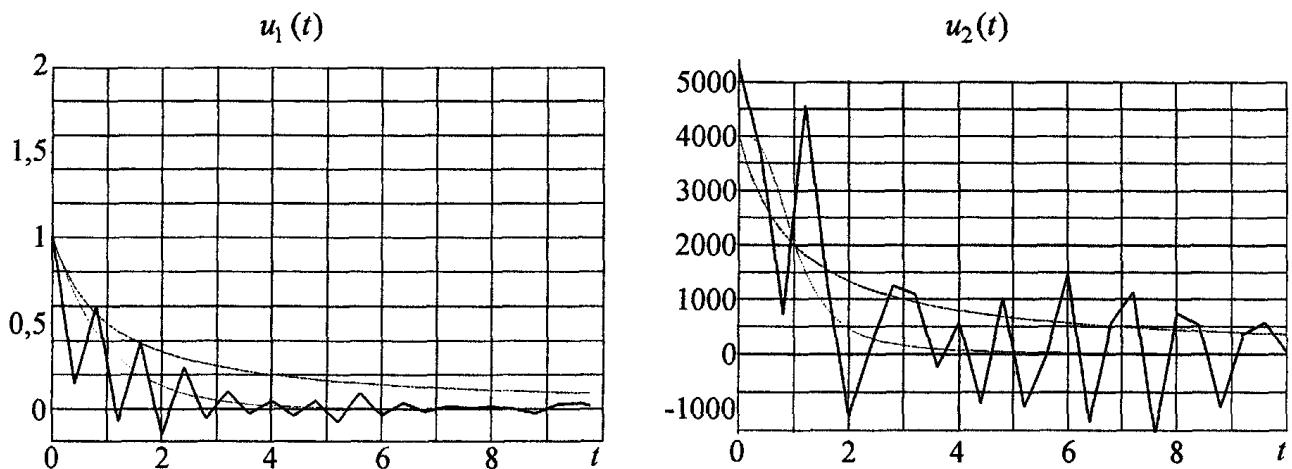


Рис. 5. Метод Ньютона–Рафсона, возмущенные данные, $n = 25$, слева – $u_1(t)$, справа – $u_2(t)$

Метод хорошо сходится к точному модельному решению при точно заданных правых частях, однако возмущение правых частей приводит к резкому ухудшению сходимости и потере точности, особенно при расчетах значений второй ($u_2(t)$) компоненты отыскиваемого решения.

Попытки получения решения на реальных данных оказались безуспешными. Качественно верный характер решений получался только при $n = 10$, но и в этом случае количественная сторона полученных решений оставляла желать лучшего. При больших значениях параметра дискретизации ситуация резко ухудшалась. Скорее всего, это связано с тем обстоятельством, что значение $n = 10$ является «естественным» в рассматриваемой задаче – правые части системы (1) экспериментально наблюдались с шагом 1 год на протяжении 10 лет.

4 .Метод наименьших квадратов

Решение системы интегральных уравнений (1)–(2) сводилось к задаче минимизации функционала

$$F(u_1, u_2) = \int_0^{10} \left[\left(\int_0^s \alpha(t-s+10, t) u_1(t-s+10) u_2(t) dt - \varphi_1(t) \right)^2 + \right. \\ \left. + \left(\int_0^s \alpha(t, t-s+10) u_1(t) u_2(t-s+10) dt - \varphi_1(t) \right)^2 \right] ds.$$

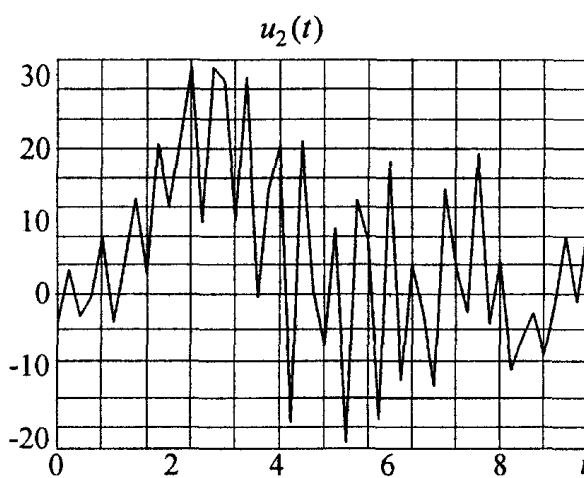
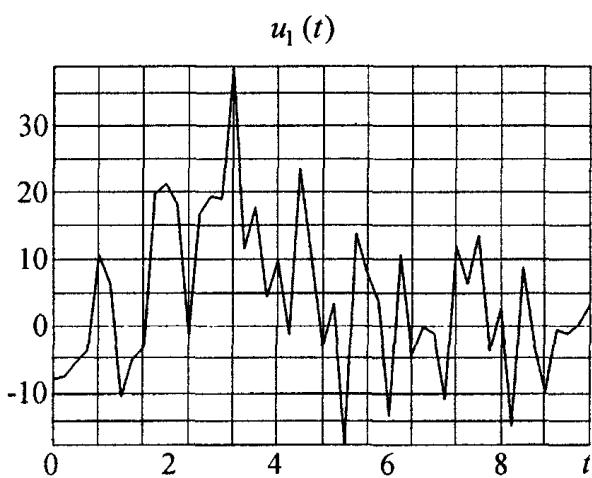
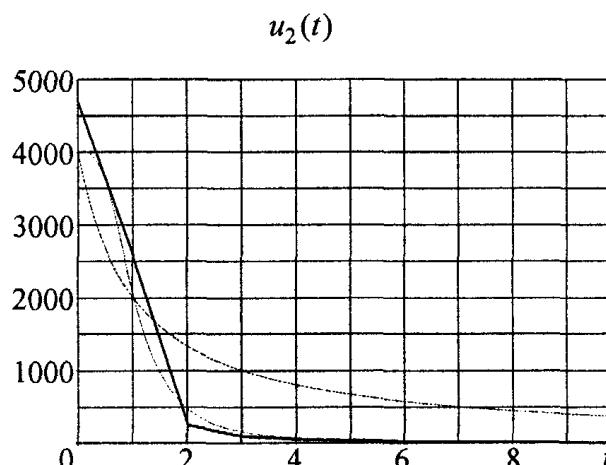
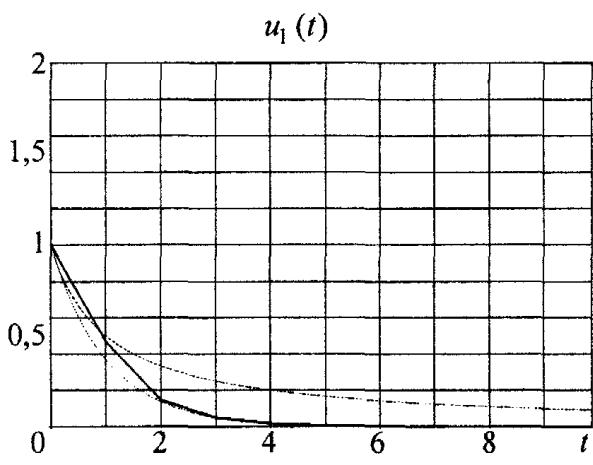
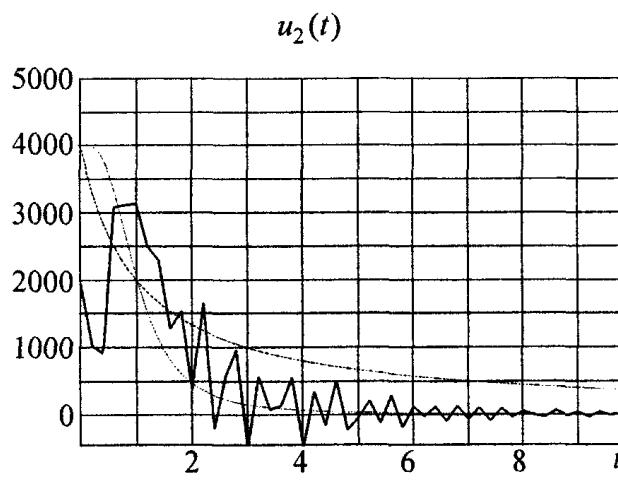
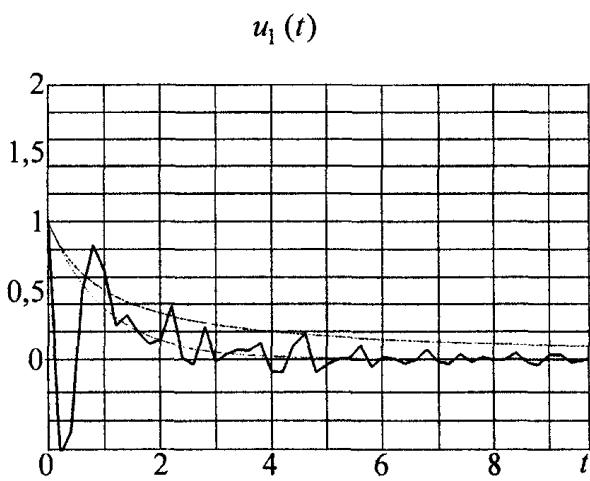
Минимизация последнего осуществлялась двумя способами – дискретизацией функционала $F(u_1, u_2) = F_n(u_{1,p}, u_{2,q})$ на сетке $0 \leq t, s \leq 10$, получаемой разложением искомых функций по системе функций (3) Лагранжа, и применением итерационного метода Ньютона–Рафсона к системе необходимых условий экстремума

$$\frac{\partial F_n(u_{1,p}, u_{2,q})}{\partial u_{1,p}} = 0, p = 1, 2, \dots, n-1, \quad \frac{\partial F_n(u_{1,p}, u_{2,q})}{\partial u_{2,q}} = 0, q = 0, 1, 2, \dots, n-1.$$

Корректировка шага τ в методе Ньютона осуществлялась, как описано выше. Этот подход (по крайней мере, в данной задаче) оказался неэффективным. Вычислительный процесс даже при точных исходных данных вел себя нерегулярно, полученные решения качественно и количественно отличались от модельных (рис. 6).

Другим способом минимизации упомянутого функционала был прямой метод минимизации – метод Ритца, использующий кусочно-линейные базисы Лагранжа (3). В этом случае прямая минимизация осуществлялась методом Хука–Дживса.

При значении параметра дискретизации $n = 10$ (рис. 7) используемый алгоритм быстро и точно восстановил модельные функции по точным правым частям. С увеличением же значения параметра дискретизации вычислительная процедура становилась неустойчивой и даже в случае сходимости минимизирующей последовательности, полученные решения, качественно описывая правильную динамику, значительно отличались от модельных (рис. 8).

Рис. 6. Метод наименьших квадратов – необходимое условие, слева – $u_1(t)$, справа – $u_2(t)$ Рис. 7. Метод наименьших квадратов – прямая минимизация, $n = 10$, слева – $u_1(t)$, справа – $u_2(t)$ Рис. 8. Метод наименьших квадратов – прямая минимизация, $n = 50$: слева – $u_1(t)$, справа – $u_2(t)$

5. Метод невязки

В этом случае задача решения системы интегральных уравнений заменялась минимизацией сглаживающего функционала

$$M^\lambda(u_1, u_2) = F(u_1, u_2) + \lambda \cdot \Omega(u_1, u_2).$$

Параметр регуляризации λ отыскивался итерационно, стабилизатор Ω был взят в виде

$$\Omega(u_1, u_2) = \int_0^{10} (\mu_1(t)u_1^2(t) + \mu_2(t)u_2^2(t) + \nu_1(t)u_1'^2(t) + \nu_2(t)u_2'^2(t)) dt .$$

Минимизация функционала $M^\lambda(u_1, u_2)$ осуществлялась на основе метода Ритца прямыми методами (Хука–Дживса, градиентными) на базе кусочно-линейной интерполяции отыскиваемых функций.

Как и выше, в случае «естественной» дискретизации задачи – при $n = 10$ – результат оказался приемлемым. Хорошо и быстро восстанавливаются искомые решения как в случае точных (рис. 9), так и «зашумленных» (рис. 10) правых частей системы.

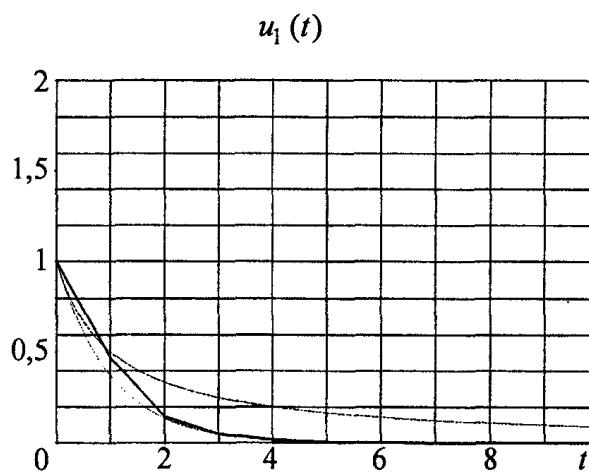


Рис. 9. Метод невязки – прямая минимизация, $n = 10$, слева – $u_1(t)$, справа – $u_2(t)$

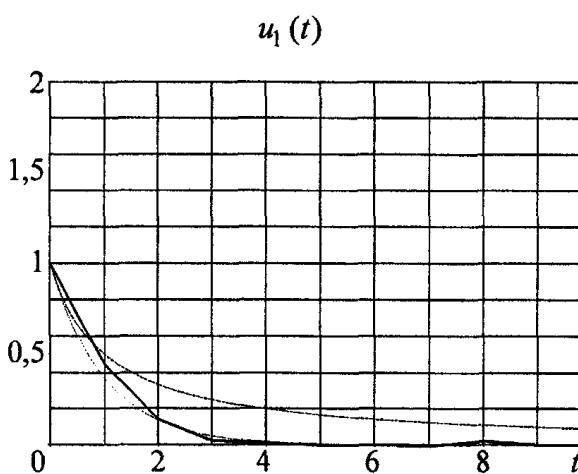
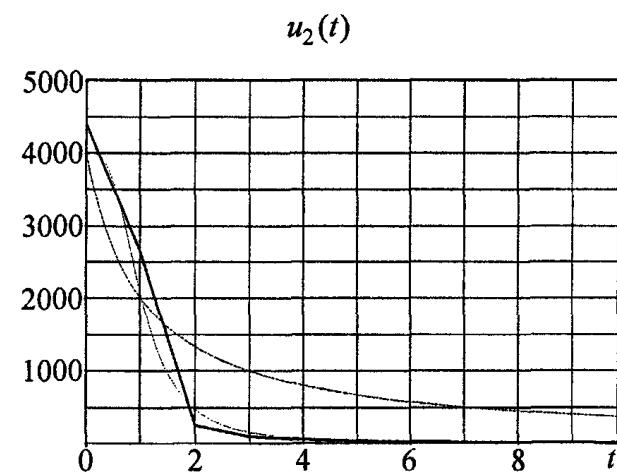


Рис. 10. Метод невязки – прямая минимизация, $n = 10$. Зашумленные данные

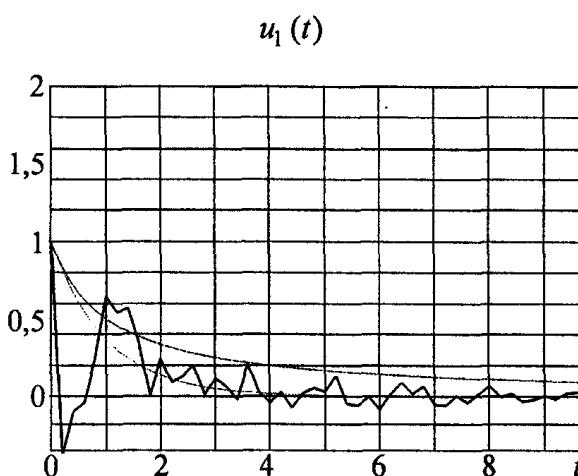
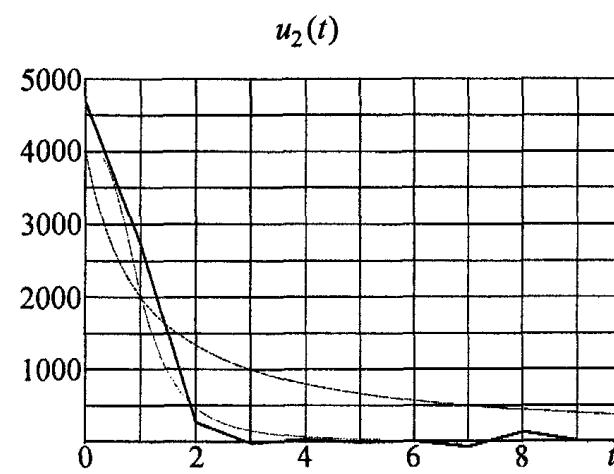


Рис. 11. Метод невязки – прямая минимизация, $n = 50$

Увеличение параметра дискретизации приводит к неустойчивости вычислительной процедуры. Если еще при $n = 25$ точность получаемых таким способом решений вполне удовлетворительна, то уже при $n = 50$ наблюдаются характерные для неустойчивых процедур «биения» (рис. 11) и решения значительно отличаются от модельных.

6. Метод невязки. Реальные данные

Метод невязки с $n = 10$ был применен для решения системы (1) с реальными правыми частями (рис. 12). Результаты расчетов приведены на рис. 13.

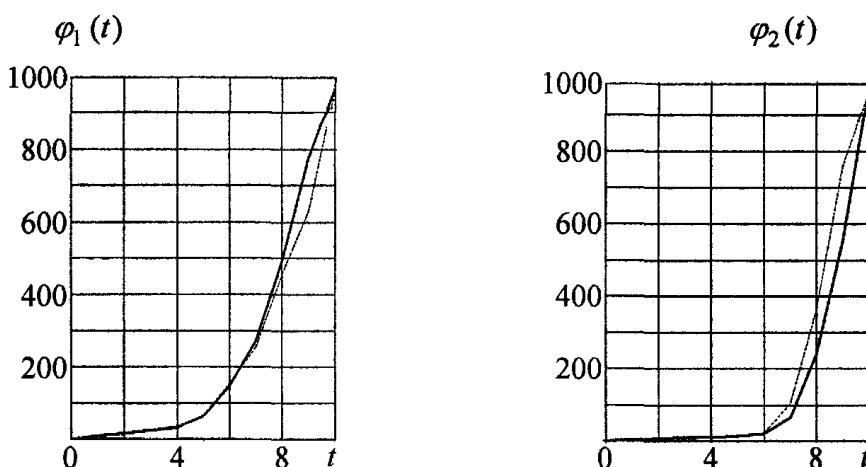


Рис. 12. Реальные данные – показания зубного датчика. Слева – φ_1 , справа – φ_2

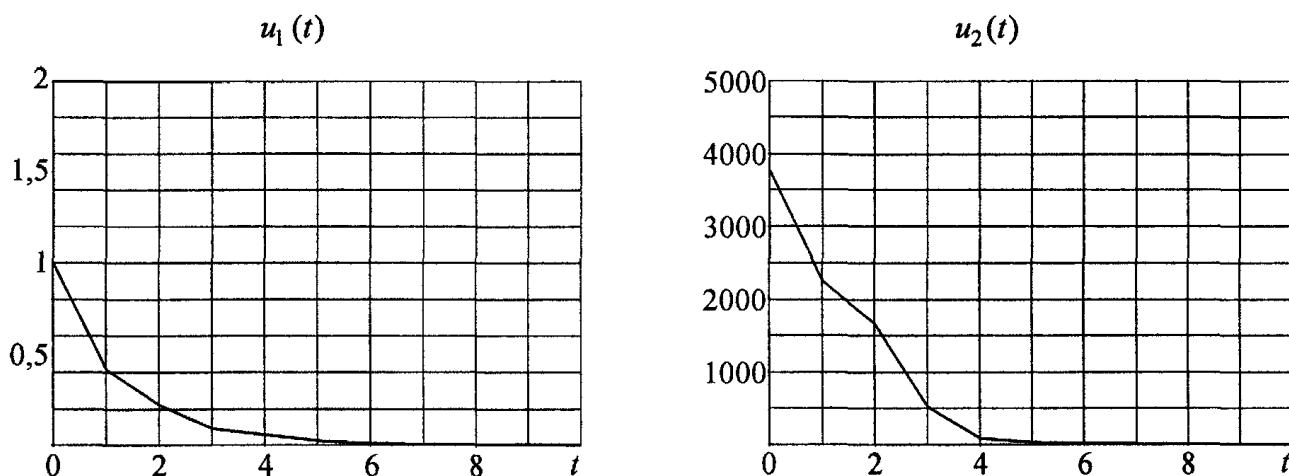


Рис. 13. Функции: слева – $u_1(t)$, справа – $u_2(t)$

Полученный результат хорошо описывает реально наблюдаемую динамику [3] и качественно и количественно согласуется с ранее полученными [5] результатами.

7. Заключение

Установлена сильная неустойчивость рассмотренных численных процедур решения системы (1). Частично подтверждено наличие эффекта «саморегуляризации» при специальном подборе параметра дискретизации задачи. Установлено, что классические регуляризующие процедуры оказываются ограниченно эффективными в случае, когда параметр дискретизации не является естественным. Полученные экспериментальные результаты требуют теоретического осмысливания.

Литература

1. Медико-биологические и экологические последствия радиоактивного загрязнения реки Теча// Под ред. А.В. Аклеева, М.Ф. Киселева. – М.: Вторая типография ФУ «Медбиоэкстрем», 2000.
2. Расин И.М. Кинетика накопления стронция-90 и формирование тканевых доз в растущем организме: Дисс. ... канд. биол. наук. – М.: ИБФ, 1970.
3. Degteva M.O., Kozheurov V.P., Tolstykh E.I. et al. The Techa River Dosimetry System: Methods for the reconstruction of internal dose// Health Phys. – 2000. – V. 79. – № 1. – P. 24–35.
4. Заляпин В.И., Кривошапов В.А. Численный анализ одной обратной задачи прикладной биофизики// Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2002. – Вып.2. – № 3(12). – С. 3–11.
5. Zalyapin V.I., Krivoschapov V.A., Degteva M.O. Numerical solution of an applied biophysics inverse problem// Inverse problem in science & Engineering. – 2004. – V. 12. – № 4. – P. 379–393.
6. Apartsin A.S., Markova E.V. On numerical solution of the multilinear Volterra equations of the first kind// Proc. of the Intern. conf. on computational mathematics, Pt.2. – Novosibirsk. – 2002. – P. 322–326.

Поступила в редакцию 6 декабря 2004 г.

ОБ УРАВНЕНИИ СОБОЛЕВСКОГО ТИПА С ПОЛИНОМИАЛЬНО ОГРАНИЧЕННОЙ ОТНОСИТЕЛЬНОЙ РЕЗОЛЬВЕНТОЙ

А.С. Макаров

В работе изучается абстрактное линейное дифференциальное уравнение соболевского типа с необратимым оператором при производной, относительная резольвента которого может иметь полиномиальный рост на бесконечности. Установлено существование разрешающей аналитической С-полугруппы этого уравнения и доказано существование и единственность решения задачи Коши при начальных данных из некоторого множества.

1. Пусть U и F – банаховы пространства, оператор $L: U \rightarrow F$ линейный и непрерывный, т.е. $L \in L(U, F)$, а оператор $M: \text{dom}M \rightarrow F$ замкнутый и линейный с областью определения $\text{dom}M$ плотной в U .

Следуя [1], введем L -резольвентное множество оператора M $\rho^L(M) = \{\mu \in \mathbb{C}: \exists (\mu L - M)^{-1} \in L(F, U)\}$. Для $\mu \in \rho^L(M)$ определим правую и, соответственно, левую L -резольвенты оператора M $R_\mu^L(M) = (\mu L - M)^{-1} L$ и $L_\mu^L(M) = L(\mu L - M)^{-1}$. Правая и левая L -резольвенты являются аналитическими функциями на L -резольвентном множестве. Справедливы правое и, соответственно, левое L -резольвентные тождества [1]:

$$R_\mu^L(M) - R_\lambda^L(M) = (\lambda - \mu) R_\mu^L(M) R_\lambda^L(M); \quad (1)$$

$$L_\mu^L(M) - L_\lambda^L(M) = (\lambda - \mu) L_\mu^L(M) L_\lambda^L(M). \quad (2)$$

Из равенств (1) и (2) следует коммутируемость операторов $R_\mu^L(M)$, $R_\lambda^L(M)$, $L_\mu^L(M)$, $L_\lambda^L(M)$.

Рассмотрим линейное уравнение соболевского типа

$$Lu = Mu. \quad (3)$$

Уравнение (3) можно редуцировать к паре эквивалентных ему уравнений

$$R_\mu^L(M)u = (\mu L - M)^{-1}Mu \quad (4)$$

и

$$L_\mu^L(M)u = M(\mu L - M)^{-1}f, \quad (5)$$

рассматриваемых, соответственно, в пространствах U и F .

В случае существования обратного оператора L^{-1} уравнение (3) сводится к уравнению

$$u = Su, \quad (6)$$

где $S = L^{-1}M$. Уравнение вида (6) при условии, что резольвента оператора S имеет не более, чем степенной рост на бесконечности, изучалось, например, в работах [2, 3]. В данной статье уравнение (3) рассматривается при предположении, что ядро $\ker L \neq \{0\}$ и L -резольвента оператора M имеет на бесконечности подстепенной рост.

2. Пусть $\theta \in (\frac{\pi}{2}; \pi)$, $\sigma \in \mathbb{R}$ и сектор $S_{\theta, \sigma} = \{\mu \in \mathbb{C}: |\arg(\mu - \sigma)| < \theta, \mu \neq \sigma\} \subset \rho^L(M)$.

Рассмотрим однопараметрические семейства $\{U^t, t \geq 0\}$ и $\{F^t, t \geq 0\}$ линейных операторов, действующих в пространствах U и F соответственно, которые определяются равенствами

$$U^t = \frac{(-1)^n}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{e^{i\mu t}}{(\mu - a)^n} R_\mu^L(M) d\mu, \quad F^t = \frac{(-1)^n}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{e^{i\mu t}}{(\mu - a)^n} L_\mu^L(M) d\mu. \quad (7)$$

Здесь $n \in \mathbb{N}$, контур

$$\Gamma = \{\mu \in C : \mu = \sigma_0 - |x| + ix \operatorname{tg} \theta, x \in R\} \subset S_{\theta, \sigma},$$

$\sigma_0 > 0$, $\sigma_0 > \sigma$, $a > \sigma_0$, направление на Γ против часовой стрелки. Далее предполагается, что правая и левая L -резольвенты оператора M удовлетворяют условию

A). Существуют такие числа $R > 0$, $\varepsilon > 0$ и $K > 0$, не зависящие от μ , что при $|\mu| > R$ ($\mu \in \rho^L(M)$)

$$\max \left(\left\| \frac{R_\mu^L(M)}{(\mu - a)^n} \right\|, \left\| \frac{L_\mu^L(M)}{(\mu - a)^n} \right\| \right) \leq \frac{K}{|\mu|^{1+\varepsilon}}.$$

При условии A) интегралы в (7) сходятся абсолютно и равномерно относительно $t \geq 0$, поэтому $U^t \in L(U)$, $F^t \in L(F)$. Семейства операторов $\{U^t, t \geq 0\}$ и $\{F^t, t \geq 0\}$ можно рассматривать как реализации семейства линейных ограниченных операторов $\{S^t, t \geq 0\}$ в банаевом пространстве B . Обозначим $S^0 = C$, $C \in L(B)$.

Определение 1. Однопараметрическое семейство $\{S^t, t \geq 0\}$ линейных ограниченных операторов называется C -полугруппой, если

$$1) S^t S^s = S^{t+s} C, \quad s, t \geq 0.$$

Если при этом выполняется еще условие

$$2) \exists Q > 0, \quad w \in R \text{ такие, что } \forall t > 0 \quad \|S^t\| \leq Q e^{wt},$$

то C -полугруппа называется экспоненциально ограниченной.

В отличие от принятого определения C -полугруппы [4] здесь не требуется сильной непрерывности полугруппы, инъективности оператора C и плотности в B области значений $\operatorname{im} C$ оператора C .

Из условия 1) определения 1 следует, что $S^t S^s = S^s S^t$, в частности $S^t C = C S^t$.

Теорема 1. Семейства $\{U^t, t \geq 0\}$ и $\{F^t, t \geq 0\}$ образуют экспоненциально ограниченные C -полугруппы.

Доказательство. Для проверки равенства 1 в определении 1 для U^t можно вместо контура Γ в интегралах (7) взять контур Γ' , полученный параллельным переносом Γ вправо, но так, чтобы точка a оставалась правее Γ' . Тогда использовав равенство (1) и изменив порядок интегрирования, найдем:

$$\begin{aligned} U^s U^t &= \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\Gamma'} \int e^{\lambda t} e^{\mu s} \frac{R_\lambda^L(M) R_\mu^L(M)}{(\lambda - a)^n (\mu - a)^n} d\mu d\lambda = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\Gamma} \frac{e^{\lambda t}}{(\lambda - a)^n} R_\lambda^L(M) d\lambda \int_{\Gamma'} \frac{e^{\mu s} d\mu}{(\mu - a)^n (\mu - \lambda)} + \\ &+ \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\Gamma'} \frac{e^{\mu s}}{(\mu - a)^n} R_\mu^L(M) d\mu \int_{\Gamma} \frac{e^{\lambda t} d\mu}{(\lambda - a)^n (\lambda - \mu)} = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\Gamma} \frac{e^{\lambda(t+s)}}{(\lambda - a)^{2n}} R_\lambda^L(M) d\lambda, \end{aligned}$$

так как по теореме о вычетах

$$\int_{\Gamma'} \frac{e^{\mu s} d\mu}{(\mu - a)^n (\mu - \lambda)} = \frac{2\pi i e^{\lambda s}}{(\lambda - a)^n}, \quad \int_{\Gamma'} \frac{e^{\lambda t} d\mu}{(\lambda - a)^n (\lambda - \mu)} = 0.$$

Так же можно показать, что

$$U^{s+t} U^0 = U^{s+t} C = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\Gamma} \frac{e^{\lambda(t+s)}}{(\lambda - a)^{2n}} R_\lambda^L(M) d\lambda.$$

Поэтому условие 1 выполняется. Для доказательства неравенства в пункте 2 определения 1 заметим, что на контуре Γ $\operatorname{Re} \mu < \sigma_0$. Поэтому, в силу абсолютной сходимости интегралов (7),

$$\|U^t\| \leq e^{t\sigma_0} \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma} \frac{\|R_\mu^L(M)\|}{|\mu - a|^n} |\mu| d\mu = Q e^{t\sigma_0}.$$

Аналогично доказывается утверждение для F^t с использованием равенства (2). \blacktriangle^1

¹ Знак \blacktriangle обозначает завершение доказательства.

Для C -полугруппы U^t оператор $C = U^0$ будем обозначать C_U , для $F^t - C_F = F^0$, т.е.

$$C_U = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{R_\mu^L(M)}{(\mu - a)^n} d\mu, \quad C_F = \frac{1}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{L_\mu^L(M)}{(\mu - a)^n} d\mu. \quad (8)$$

3. Уравнения (3), (4) и (5) можно рассматривать как конкретные интерпретации уравнения

$$Gv = Bv, \quad (9)$$

где $G \in L(B)$, оператор $B : \text{dom } B \subset B \rightarrow B$ линеен, замкнут, плотно определен в B , B – банаово пространство.

Решением уравнения (9) назовем функцию $v \in C([0, +\infty); B) \cap C^\infty((0, +\infty); B)$, удовлетворяющую этому уравнению.

Определение 2. Отображение $S^* \in C^\infty((0, +\infty); L(B))$ называется разрешающей C -полугруппой уравнения (9), если:

- 1) $S^* : (0, +\infty) \rightarrow L(B) – C$ -полугруппа;
- 2) $\forall x \in B$ функция $x(t) = S^t x$ является решением уравнения (9).

C -полугруппа $S^* : (0, +\infty) \rightarrow L(B)$ называется аналитической, если она продолжима в некоторый сектор комплексной плоскости, содержащий положительную полуось.

Теорема 2. Существуют разрешающие аналитические экспоненциально ограниченные C -полугруппы уравнений (4) и (5).

Доказательство. Искомые C -полугруппы задаются равенствами (7). Интегралы (7) допускают аналитическое продолжение в сектор $\Sigma = \{\tau \in \mathbb{C} : |\arg \tau| < \theta - \frac{\pi}{2}\}$, так как при $\mu \in \Gamma$ и $\tau \in \Sigma$ $\cos(\arg \mu + \tau) < 0$ и поэтому возможно дифференцирование по параметру под знаком интеграла. При любом $u_0 \in U$ вектор-функция $u(t) = U^t u_0$ удовлетворяет уравнению (4):

$$\begin{aligned} R_\mu^L(M)u - (\mu L - M)^{-1}Mu &= (\mu L - M)^{-1}(Lu - Mu) = \\ &= \frac{(-1)^n}{2\pi i} (\mu L - M)^{-1} \int_{\Gamma} \frac{e^{\lambda t}}{(\lambda - a)^n} (\lambda L - M)(\lambda L - M)^{-1} Lu_0 d\lambda = 0. \end{aligned}$$

Аналогично проверяется, что $f(t) = F^t f_0$ является решением уравнения (5) при любом $f_0 \in F$. ▲

Так же как для обычных резольвент [5], для правой и левой L -резольвенты оператора M имеют место равенства

$$(R_\mu^L(M))^{(k)} = (-1)^k k! (R_\mu^L(M))^{k+1}, \quad (10)$$

$$(L_\mu^L(M))^{(k)} = (-1)^k k! (L_\mu^L(M))^{k+1}. \quad (11)$$

Вычислим оператор C_U для C -полугруппы U^t . Для этого воспользуемся замкнутым контуром, состоящем из дуги I_r окружности с центром в точке a и радиуса $r > R$, где R – число, фигурирующее в условии A), и части Γ_r контура Γ , содержащейся внутри окружности. Тогда, в силу (10),

$$\begin{aligned} C_U = U^0 &= \frac{(-1)^n}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{R_\mu^L(M)}{(\mu - a)^n} d\mu = \frac{(-1)^n}{2\pi i} \lim_{r \rightarrow \infty} \int_{\Gamma_r} \frac{R_\mu^L(M)}{(\mu - a)^n} d\mu = \\ &= \frac{(-1)^n}{2\pi i} \left(\lim_{r \rightarrow \infty} \int_{I_r \cup \Gamma_r} \frac{R_\mu^L(M)}{(\mu - a)^n} d\mu - \lim_{r \rightarrow \infty} \int_{I_r} \frac{R_\mu^L(M)}{(\mu - a)^n} d\mu \right) = \\ &= (-1)^{n+1} \operatorname{Res}_{\mu=a} \frac{R_\mu^L(M)}{(\mu - a)^n} = \frac{(-1)^{n+1}}{(n-1)!} (R_a^L(M))^{(n-1)} = \frac{(-1)^{n+1}}{(n-1)!} (-1)^{n-1} (n-1)! (R_a^L(M))^n = (R_a^L(M))^n. \end{aligned}$$

Здесь первый интеграл по $\Gamma \cup l_r$ вычислен с помощью вычетов с учетом направления по часовой стрелке на контуре, предел второго интеграла по l_r в силу условия А) равен нулю. Аналогично показывается, что $C_F = (L_a^L(M))^n$.

4. Рассмотрим задачу Коши

$$v(0) = v_0 \quad (12)$$

для уравнения (9). Для уравнений (6) и (7) начальное условие (12) сводится, соответственно, к виду

$$u(0) = u_0, \quad (13)$$

$$f(0) = f_0. \quad (14)$$

Теорема 3. Для любого $u_0 \in \text{im}C_U$ ($f_0 \in \text{im}C_F$) задача Коши (13) ((14)) для уравнения (4) ((5)) разрешима.

Доказательство. Пусть $u_0 \in \text{im}C_U$, т.е. $u_0 = C_U z_0$ для некоторого $z_0 \in U$. Тогда в силу теоремы 2, функция $u(t) = U^t z_0$ является решением уравнения (4). Условие (13) $u(0) = U^0 z_0 = C_U z_0 = u_0$ также выполняется. \blacktriangle

Так как C -полугруппы U^\bullet и F^\bullet , определяемые равенствами (7), в силу теоремы 2 экспоненциально ограниченные, то можно вычислить их преобразования Лапласа. Вычислим преобразование Лапласа $L_\mu(U)$ C -полугруппы U^\bullet . Изменив порядок интегрирования и применив теорему о вычетах, получим при $\operatorname{Re} \mu > a > \operatorname{Re} \lambda$

$$\begin{aligned} L_\mu(U) &= \int_0^\infty e^{-\mu t} U^t dt = \frac{(-1)^n}{2\pi i} \int_{\Gamma} R_\lambda^L(M) \frac{d\lambda}{(\lambda - a)^n} \int_0^\infty e^{(\lambda - \mu)t} dt = \frac{(-1)^n}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{R_\lambda^L(M) d\lambda}{(\lambda - a)^n (\mu - \lambda)} = \\ &= (-1)^n \operatorname{Res}_{\lambda=a} \frac{R_\lambda^L(M)}{(\lambda - \mu)(\lambda - a)^n} + (-1)^n \operatorname{Res}_{\lambda=\mu} \frac{R_\lambda^L(M)}{(\lambda - \mu)(\lambda - a)^n} = \\ &= \frac{(-1)^n}{(n-1)!} \left(\frac{R_\lambda^L(M)}{\lambda - \mu} \right)^{(n-1)} \Big|_{\lambda=a} + (-1)^n \frac{R_\mu^L(M)}{(\mu - a)^n}. \end{aligned} \quad (15)$$

Вычислим в (15) первое слагаемое:

$$\begin{aligned} \frac{(-1)^n}{(n-1)!} \left(\frac{R_\lambda^L(M)}{\lambda - \mu} \right)^{(n-1)} \Big|_{\lambda=a} &= \frac{(-1)^n}{(n-1)!} \sum_{i=0}^{n-1} C_{n-1}^i ((\lambda - \mu)^{-1})^{(n-1-i)} \Big|_{\lambda=a} (R_\lambda^L(M))^{(i)} \Big|_{\lambda=a} = \\ &= \frac{(-1)^n}{(n-1)!} \sum_{i=0}^{n-1} C_{n-1}^i (-1)^{n-1-i} (n-1-i)! (a - \mu)^{-(n-i)} (-1)^i i! (R_a^L(M))^{i+1} = \\ &= - \sum_{i=0}^{n-1} \frac{(R_a^L(M))^{i+1}}{(a - \mu)^{n-i}} = - \frac{R_a^L(M)}{(a - \mu)^n} \sum_{i=0}^{n-1} (a - \mu)^i (R_a^L(M))^i. \end{aligned} \quad (16)$$

Для вычисления последней суммы воспользуемся равенством:

$$(I - (a - \mu)R_a^L(M)) \sum_{i=0}^{n-1} (a - \mu)^i (R_a^L(M))^i = I - (a - \mu)^n (R_a^L(M))^n. \quad (17)$$

Справедливо равенство $I - (a - \mu)R_a^L(M) = (aL - M)^{-1}(\mu L - M)$, в котором оператор, стоящий справа, можно считать определенным на всем пространстве U в силу замкнутости M и плотности $\text{dom } M$ в U .

Если $\mu \in \rho^L(M)$, то $\exists(\mu L - M)^{-1}$ и, следовательно, существует

$$(I - (a - \mu)R_a^L(M))^{-1} = (\mu L - M)^{-1}(aL - M).$$

Тогда из (17) следует, что

$$\sum_{i=0}^{n-1} (a - \mu)^i (R_a^L(M))^i = (\mu L - M)^{-1}(aL - M)(I - (a - \mu)^n C_U). \quad (18)$$

Подставив (18) в (16), получим

$$\begin{aligned} \frac{(-1)^n}{(n-1)!} \left(\frac{R_\lambda^L(M)}{\lambda - \mu} \right)^{(n-1)} \Bigg|_{\lambda=a} &= -\frac{1}{(a-\mu)^n} (aL-M)^{-1} L(\mu L-M)^{-1} (aL-M)(I-(a-\mu)^n C_U) = \\ &= -\frac{1}{(a-\mu)^n} R_\mu^L(M)(I-(a-\mu)^n C_U). \end{aligned}$$

Из равенства (15) имеем окончательно: $L_\mu(U) = C_U R_\mu^L(M)$. Аналогично можно получить равенство $L_\mu(F) = C_F R_\mu^L(M)$, справедливое при $\operatorname{Re} \mu > a$.

Лемма 1. При $\operatorname{Re} \mu > a$ справедливо неравенство

$$\max(\|L_\mu(U)\|, \|L_\mu(F)\|) \leq \frac{Q}{\operatorname{Re} \mu - \sigma_0}, \quad (19)$$

где постоянная Q не зависит от μ .

Доказательство. В силу теоремы 1 $\|U^t\| \leq Q_1 e^{t\sigma_0}$, $\|F^t\| \leq Q_2 e^{t\sigma_0}$. Тогда

$$\|L_\mu(U)\| \leq Q_1 \int_0^\infty e^{-t\operatorname{Re} \mu} e^{t\sigma_0} dt = \frac{Q_1}{\operatorname{Re} \mu - \sigma_0}.$$

Аналогично $\|L_\mu(F)\| \leq \frac{Q_2}{\operatorname{Re} \mu - \sigma_0}$. Положив $Q = \max(Q_1, Q_2)$, получим неравенство (19). \blacktriangle

Вектор $\varphi_0 \in \ker L \setminus \{0\}$ будем называть собственным вектором оператора L . Упорядоченное множество $\{\varphi_1, \varphi_2, \dots\}$ векторов из U называется цепочкой M -присоединенных векторов вектора φ_0 , если $L\varphi_{q+1} = M\varphi_q$, $q = 0, 1, \dots$ и $\varphi_q \notin \ker L \setminus \{0\}$, $q = 1, 2, \dots$ [1]. Порядковый номер вектора в цепочке называется его высотой, а порядковый номер последнего вектора, в случае конечной цепочки, называется высотой этой цепочки. Линейная оболочка M -присоединенных векторов оператора L называется его M -корневым линеалом. В [6] доказано, что M -корневой линеал оператора L состоит только из M -присоединенных векторов оператора L и нуля.

Лемма 2. Если φ_q M -присоединенный вектор вектора φ_0 высоты не больше q , то $(-1)^q (R_a^L(M))^{q-1} R_\mu^L(M) \varphi_q = \varphi_0$. Вектор φ_q M -присоединенный вектор оператора L высоты не больше q точно тогда, когда $(R_a^L(M))^q R_\mu^L(M) \varphi_q = 0$.

Доказательство проводится почти так же, как доказательство аналогичного утверждения в [6].

Лемма 3. Длины всех цепочек M -присоединенных векторов оператора L ограничены числом n .

Доказательство. Пусть φ_{n+1} – M -присоединенный вектор вектора φ_0 высоты $n+1$. Тогда в силу леммы 2

$$\varphi_0 = (-1)^{n+1} (R_\mu^L(M))^n R_\mu^L(M) \varphi_{n+1} = (-1)^{n+1} L_\mu(U) \varphi_{n+1},$$

где $\varphi_0 \in \ker L \setminus \{0\}$. Отсюда. В силу (19), имеем:

$$\|\varphi_0\| \leq \|L_\mu(U)\| \cdot \|\varphi_{n+1}\| \leq \frac{Q}{\operatorname{Re} \mu - a} \|\varphi_{n+1}\| \rightarrow 0$$

при $\operatorname{Re} \mu \rightarrow \infty$. Следовательно, $\varphi_0 = 0$. Что противоречит выбору φ_0 . \blacktriangle

Лемма 4. Справедливы равенства

$$\ker L_\mu(U) \cap \operatorname{im} L_\mu(U) = \{0\}, \quad (20)$$

$$\ker L_\mu(F) \cap \operatorname{im} L_\mu(F) = \{0\}. \quad (21)$$

Доказательство. Пусть ненулевой вектор φ , принадлежит левой части равенства (20). Тогда $\exists \psi \in U$ такой, что $\varphi = (R_a^L(M))^n R_\mu^L(M) \psi \in \ker L_\mu(U)$. Следовательно,

$$(R_a^L(M))^{2n} (R_\mu^L(M))^2 \psi = 0.$$

В силу леммы 2 это означает, что вектор ψ является M -присоединенным вектором оператора L высоты не больше $2n+1$. Но по лемме 3 его высота не больше n . Поэтому $\varphi = (R_a^L(M))^n R_\mu^L(M)\psi = 0$.

Пусть f принадлежит теперь левой части равенства (21). Тогда $f = (L_a^L(M))^n L_\mu^L(M)g$, $g \in F$. Кроме того $(L_a^L(M))^n L_\mu^L(M)f = 0$. Следовательно, $(L_a^L(M))^{2n}(L_\mu^L(M))^2 g = 0$ или $(R_a^L(M))^{2n}(R_\mu^L(M))^2(aL - M)^{-1}g = 0$, т.е. $(aL - M)^{-1}g \in \ker(R_a^L(M))^{2n}(R_\mu^L(M))^2$. Это означает согласно лемме 2, что вектор $(aL - M)^{-1}g$ является M -присоединенным высоты не больше $2n+1$. Но его высота не может быть больше n . Поэтому $(R_a^L(M))^n R_\mu^L(M)(aL - M)^{-1}g = 0$ или, применив к последнему равенству оператор L , $f = (L_a^L(M))^n L_\mu^L(M)g = 0$. \blacktriangle

Определение 3. Замкнутое множество $\Phi \subset B$ называется фазовым пространством уравнения (9), если

- 1) любое решение v уравнения (9) лежит в Φ , т.е. $\forall t > 0 \quad v(t) \in \Phi$;
- 2) для любого v_0 из некоторого плотного в Φ множества Φ_0 существует единственное решение задачи Коши $v(0) = v_0$ для уравнения (9).

Обозначим $U^1(F^1)$ замыкание $\text{im}L_\mu(U)$ ($\text{im}L_\mu(F)$).

Теорема 4. Пусть операторы L и M удовлетворяют условию А). Тогда $U^1(F^1)$ является фазовым пространством уравнения (4) ((5)).

Доказательство. Если u – решение уравнения (4), то, как показано в [7], $\forall \lambda \in \rho^L(M)$, $\forall k \in N$

$$u = (R_\lambda^L(M))^k (\lambda - \frac{d}{dt})^k u.$$

Положив здесь $\lambda = a$, $k = n$ и используя это равенство при $\lambda = \mu$ и $k = 1$, получим:

$$u = (R_a^L(M))^n (a - \frac{d}{dt})^n R_\mu^L(M)(\mu - \frac{d}{dt})u = (R_\lambda^L(M))^n R_\mu^L(M)(a - \frac{d}{dt})^n (\mu - \frac{d}{dt})u.$$

Отсюда следует, что $u \in \text{im}L_\mu(U) \subset U^1$. Пусть $u_0 \in \text{im}L_\mu(U)$, т.е. $u_0 = C_U R_\mu^L(M)x_0$, $x_0 \in U$. Тогда функция $u(t) = U^t R_\mu^L(M)x_0$ в силу теоремы 3 является решением задачи Коши $u(0) = u_0$ для уравнения (4). Докажем единственность этого решения. Пусть v – другое решение задачи Коши $v(0) = u_0$ для уравнения (4). Рассмотрим на $[0, t]$ функцию $w(s) = U^{t-s} R_\alpha^L(M)v(s)$. Найдем

$$\begin{aligned} w'(s) &= R_\alpha^L(M) \frac{(-1)^n}{2\pi i} \int_{\Gamma} e^{\mu(t-s)} \frac{R_\mu^L(M)}{(\mu - a)^n} (v'(s) - \mu v(s)) d\mu = \\ &= R_\alpha^L(M) \frac{(-1)^n}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{e^{\mu(t-s)}}{(\mu - a)^n} (R_\mu^L(M)v'(s) - \mu R_\mu^L(M)v(s)) d\mu = \\ &= R_\alpha^L(M) \frac{(-1)^n}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{e^{\mu(t-s)}}{(\mu - a)^n} (R_\mu^L(M)v'(s) - (\mu L - M)^{-1} M v(s) - v(s)) d\mu = \\ &= R_\alpha^L(M) \frac{(-1)^n}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{e^{\mu(t-s)}}{(\mu - a)^n} (R_\mu^L(M)v'(s) - (\mu L - M)^{-1} M v(s)) d\mu - R_\alpha^L(M) \frac{(-1)^n}{2\pi i} \int_{\Gamma} \frac{e^{\mu(t-s)}}{(\mu - a)^n} d\mu = 0. \end{aligned}$$

Следовательно, $w(0) = w(t)$, т.е.

$$U^t R_\alpha^L(M)v(0) = C_U R_\alpha^L(M)v(t) \text{ или } U^t R_\alpha^L(M)C_U R_\mu^L(M)x_0 - C_U R_\alpha^L(M)v(t) = 0.$$

Отсюда

$$C_U R_\alpha^L(M)(U^t R_\mu^L(M)x_0 - v(t)) = C_U R_\alpha^L(M)(u(t) - v(t)) = 0.$$

Поэтому $u(t) - v(t) \in \ker L_\alpha(U)$. Кроме того, как показано выше, $u(t) - v(t) \in \text{im } L_\mu(U) = \text{im } L_\alpha(U)$. Тогда в силу равенства (20), $u(t) = v(t)$. Доказательство для уравнения (5) проводится аналогично. ▲

Литература

1. Свиридов Г.А. К общей теории полугрупп операторов// УМН. – 1994. – Т. 49. – Вып. 4 (298). – С. 47–74.
2. Крейн С.Г. Линейные дифференциальные уравнения в банаховом пространстве. – М.: Наука, 1967. – 275 с.
3. Иванов В.К., Мельникова И.В., Филинков А.И. Дифференциально-операторные уравнения и некорректные задачи. – М.: Наука, 1999. – 175 с.
4. Мельникова И.В., Филинков А.И. Интегрированные полугруппы и C -полугруппы. Корректность и регуляризация дифференциально-операторных задач// УМН. – 1994. – Т. 49. – Вып. 6(300). – С. 11–150.
5. Данфорд Н., Шварц Дж.Т. Линейные операторы. Общая теория. – М.: ИИЛ, 1962.
6. Федоров В.Е. Полугруппы и группы операторов с ядрами. – Челябинск: ЧелГУ, 1988. – 78 с.
7. Федоров В.Е. Исследование разрешающих полугрупп линейных уравнений типа Соболева: Дисс....канд. физ.-мат. наук. – Екатеринбург, 1996.

Поступила в редакцию 30 ноября 2004 г.

ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ТЕОРИИ ИЗМЕРЕНИЙ

Е.В. Харитонова

В работе рассматривается модель измерений, построенная на базе анализа обратной многоточечной краевой задачи для обыкновенного дифференциального уравнения, приводящая к исследованию интегрального уравнения Фредгольма первого рода. Регуляризации процедуры получения решения осуществляется методом невязки.

Одной из проблем теории и практики динамических измерений является проблема оперативного оценивания детектируемого сигнала в условиях, когда входной сигнал трудно поддается прямому измерению, а выходной содержит значительную часть динамической погрешности (например, при измерении импульсных или других, быстро меняющихся во времени, сигналов).

Существует несколько различных подходов к решению этой задачи. Среди них анализ амплитудно-фазовых характеристик системы, методы коррекции, методы модельного контроля и др.

В настоящей работе рассматривается модель измерений, построенная на базе анализа обратной многоточечной краевой задачи для обыкновенного дифференциального уравнения, приводящая к исследованию интегрального уравнения Фредгольма первого рода. Для регуляризации процедуры получения решения используется классический метод А.Н. Тихонова.

Существенное упрощение собственно процедуры регуляризации решения и оценивания параметра регуляризации достигается за счет использования конечно-элементных конечномерных аппроксимаций.

1. Введение

Задачи, возникающие в теории динамических измерений, могут быть условно разделены на две группы – задачи восстановления сигнала и задачи анализа динамической погрешности. Первая из упомянутых задач – определение входного сигнала, искаженного средствами измерений, – в общей постановке, представляет собой обратную задачу теории измерений, которая может быть сформулирована как задача решения операторного уравнения

$$A \cdot u(t) = x(t)$$

относительно функции $u(t)$ при неточно заданных операторе A и правой части $x(t)$. Известно (например [2],[3]), что в таких задачах обратный оператор A^{-1} как правило неограничен, что приводит к неустойчивости численных процедур решения указанного уравнения.

В подавляющем большинстве случаев метод невязки [2] Тихонова А.Н. (или метод регуляризации, например, метод квазирешений [3] Иванова В.К. и т.п.) дает возможность получения приближенного регуляризованного решения указанной задачи с одновременной оценкой точности получаемого решения.

В важном для приложений случае, когда функции $u(t)$ и $x(t)$ связаны дифференциальным соотношением $L[x(t)] = u(t)$, $L[\cdot]$ – дифференциальный оператор, приведенное выше операторное уравнение представляет собой интегральное уравнение первого рода (Вольтерра или Фредгольма – в зависимости от постановки задачи), методы решения которого хорошо изучены в теории (например [2, 4, 9] и цитированная там литература).

Тем не менее, численная реализация того или иного метода регуляризации по-прежнему является довольно тонкой задачей, и эффективность применяемых алгоритмов напрямую связана с избранным способом дискретизации задачи. Априори, дискретизация задачи может быть осуществлена в следующих направлениях:

- дискретизация интегрального уравнения с последующей регуляризацией полученной системы алгебраических уравнений;
- построение минимизирующего функционала с последующей его дискретизацией проекционными методами (например, методом Ритца);

- построение минимизирующего функционала с последующей дискретизацией уравнения Эйлера, описывающего необходимые условия экстремума построенного функционала.

В настоящей работе используется второй подход, отличающийся от общепринятых методов дискретизации использованием кусочно-элементных базисов Лагранжа, что приводит к значительному снижению объема вычислений и эффективным процедурам регуляризации.

2. Постановка задачи

Входной сигнал $u(t)$ первичного преобразователя (датчика) недоступен прямому наблюдению и регистрации и восстанавливается по наблюдениям за выходными показателями $x(t)$ измерительных приборов.

Наблюдаемый сигнал $x(t)$ является решением краевой задачи

$$\begin{aligned} L(x) &= x^{(n)}(t) + a_{n-1}(t)x^{(n-1)}(t) + \dots + a_1(t)x'(t) + a_0(t)x(t) = u(t); \\ U_j(x) &= l_j, \quad j = 1, \dots, n \end{aligned} \quad (1)$$

где $U_j(x)$ – линейные в $C^n[a, b]$ функционалы.

Пусть $\varphi_i(t)$, $i = 1, \dots, n$ – фундаментальная система решений однородного уравнения $L(x) = 0$.

Если выполнено условие $\det|U_j(\varphi_i)| \neq 0$, то задача (1) однозначно разрешима [1] и задача восстановления $U(t)$ по экспериментальным данным $x(t)$ может быть поставлена как задача решения интегрального уравнения Фредгольма I рода

$$\int_a^b G(t, \tau)u(\tau)d\tau = \tilde{x}(t), \quad (2)$$

где $G(t, \tau)$ – функция Грина краевой задачи (1), $\tilde{x}(t)$ – «исправленный» наблюдаемый сигнал,

даваемый соотношением $\tilde{x}(t) = x(t) - \Psi_U(t) + \int_a^b G(t, \tau)L(\Psi_U(\tau))d\tau$, где $\Psi_U(t) = \sum a_i \varphi_i(t)$ – интерполяционный многочлен, ассоциированный с граничными условиями рассматриваемой краевой задачи, существование и единственность которого обеспечивается упомянутым выше условием $\det|U_j(\varphi_i)| \neq 0$.

3. Функция Грина

Пусть $L(x) = u$ линейное дифференциальное уравнение n -го порядка

$$L(x) = x^{(n)} + a_{n-1}(t)x^{(n-1)} + \dots + a_1(t)x' + a_0(t)x = u, \quad (3)$$

$U_1(x), U_2(x), \dots, U_n(x)$ – линейно-независимые линейные функционалы (непрерывные) в $C^n[a, b]$.

Однородной краевой задачей для уравнения (3) будем называть задачу

$$L(x) = 0; \quad U_j(x) = 0, \quad j = 1, \dots, n. \quad (4)$$

Если $\varphi_1(t), \dots, \varphi_n(t)$ – фундаментальная система решений (3), то решение задачи (4) имеет вид:

$$x^0(t) = c_1\varphi_1 + \dots + c_n\varphi_n, \quad (5)$$

где постоянные $c_j, j = 1, \dots, n$ определяются соотношениями:

$$\left\{ \begin{array}{l} c_1U_1(\varphi_1) + c_2U_1(\varphi_2) + \dots + c_nU_1(\varphi_n) = 0 \\ \dots \\ c_1U_n(\varphi_1) + c_2U_n(\varphi_2) + \dots + c_nU_n(\varphi_n) = 0 \end{array} \right. \quad (6)$$

Очевидно, что если ранг матрицы $U = \|U_j(\varphi_k)\|_{j,k=1,\dots,n}$ равен n , то у системы (6) существует только тривиальное решение $c_i = 0$. Краевая задача (4) при этом имеет только нулевое решение. В этом случае неоднородная краевая задача

$$L(x) = u, \quad U_j(x) = 0, j = 1, \dots, n \quad (7)$$

однозначно разрешима для любой непрерывной правой части $u(t)$, $t \in [a, b]$ и справедлива формула

$$x(t) = \int_a^b G(t, \tau) u(\tau) d\tau, \quad (8)$$

где $G(t, \tau)$ – функция Грина дифференциального оператора (4), определяемая следующими условиями:

1. $G(t, \tau)$ – непрерывна и непрерывно-дифференцируема по переменной x вплоть до $(n-2)$ -го порядка включительно.

2. $\forall \tau \in [a, b]$ $G(t, \tau)$ обладает непрерывными производными порядков $n-1$ и n по переменной x в каждом из интервалов $[a, \tau)$ и $(\tau, b]$. При этом производная $(n-1)$ порядка имеет в точке $x = \tau$ скачок, равный 1 (в общем случае – равный $\frac{1}{a_n(t)}$, где $a_n(t)$ – коэффициент при старшей производной в (3)):

$$\left. \frac{\partial^{n-1} G(t, \tau)}{\partial t^{n-1}} \right|_{t=\tau+} - \left. \frac{\partial^{n-1} G(t, \tau)}{\partial t^{n-1}} \right|_{t=\tau-} = 1. \quad (9)$$

3. В каждом из интервалов $[a, \tau)$ и $(\tau, b]$ функция Грина $G(t, \tau)$ является решением краевой задачи (4).

4. Функция Грина определяется единственным образом, если только выполнено условие однозначной разрешимости задачи (4).

Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$ – фундаментальная система решений однородного уравнения $L(x) = 0$. Тогда

$$\forall t \in [a, \tau]: G(t, \tau) = \sum_{i=1}^n \alpha_i(\tau) \varphi_i(t); \quad \forall t \in (\tau, b]: G(t, \tau) = \sum_{i=1}^n \beta_i(\tau) \varphi_i(t).$$

Условия непрерывности функции Грина и первых ее $(n-2)$ производных дают:

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^n [\alpha_i(\tau) - \beta_i(\tau)] \varphi_i(\tau) = 0 \\ \sum_{i=1}^n [\alpha_i(\tau) - \beta_i(\tau)] \varphi'_i(\tau) = 0 \\ \dots \\ \sum_{i=1}^n [\alpha_i(\tau) - \beta_i(\tau)] \varphi_i^{(n-2)}(\tau) = 0 \end{array} \right. \quad (10)$$

Из условия на скачок $(n-1)$ производной в точке $t = \tau$, получаем:

$$\sum_{i=1}^n [\alpha_i(\tau) - \beta_i(\tau)] \varphi_i^{(n-1)}(\tau) = -1. \quad (11)$$

Уравнения (10) и (11) образуют систему n линейных уравнений относительно неизвестных разностей $\alpha_i(\tau) - \beta_i(\tau)$, $i = 1, \dots, n$, определитель которой

$$W[\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n] = \Delta = \begin{vmatrix} \varphi_1 & \varphi_2 & \dots & \varphi_n \\ \varphi_1' & \varphi_2' & \dots & \varphi_n' \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_1^{(n-1)} & \varphi_2^{(n-1)} & \dots & \varphi_n^{(n-1)} \end{vmatrix} \neq 0$$

в силу линейной независимости функций $\varphi_j(\tau)$.

Краевые условия (4) примененные к функции Грина дают:

$$U_j(G(t, \tau)) = 0, \quad j = 1, \dots, n.$$

Подробнее, в силу линейности функционалов $U_j(x)$, получаем:

$$\left\{ \sum_{i=1}^n \mu_i(\tau) U_j(\varphi_i(t)) = 0, \quad j = 1, \dots, n, \right. \quad (12)$$

где $\mu_i(\tau) = \begin{cases} \alpha_i(\tau), & t \in [a, \tau) \\ \beta_i(\tau), & t \in (\tau, b] \end{cases}$.

Положим $\gamma_i(\tau) = \alpha_i(\tau) - \beta_i(\tau)$, $i = 1, \dots, n$. Значения $\gamma_i(\tau)$ однозначно определяются упомянутой выше системой (10)–(11). Поэтому система (12) является системой n линейных (относительно, например $\alpha_i(\tau)$) уравнений ($\beta_i = \gamma_i - \alpha_i$), определитель которой $U = \|U_j(\varphi_i)\|$ не равен нулю в силу принятых допущений. Следовательно, она однозначно разрешима, чем и завершается построение функции Грина краевой задачи (4).

Функция Грина будет задаваться соотношением

$$G(t, \tau) = \begin{cases} \sum_{i=1}^n \alpha_i(\tau) \varphi_i(t), & a \leq t < \tau; \\ \sum_{i=1}^n \beta_i(\tau) \varphi_i(t), & \tau < t \leq b. \end{cases} \quad (13)$$

Рассмотрим уравнение n -го порядка с краевыми условиями:

$$\left. \begin{array}{l} L(x) = x^{(n)} + a_{n-1}(t)x^{(n-1)} + \dots + a_1(t)x'(t) + a_0(t)x = u \\ U_j(x) = x(t_j), \quad j = 1, \dots, n. \end{array} \right\} \quad (14)$$

Здесь $t_j \in [a, b]$, $a = t_0 < t_1 < \dots < t_n = b$.

Пусть τ выбрана так, что $t_k < \tau < t_{k+1}$. Тогда

$$G(t, x) = \begin{cases} \sum \alpha_i \varphi_i(t), & t < \tau \\ \sum \beta_i \varphi_i(t) & t > \tau \end{cases}.$$

Полагая, как и выше $\gamma_i = \alpha_i - \beta_i$, запишем условия непрерывности (10) – (11):

$$\left\{ \begin{array}{l} \sum_{i=1}^n \gamma_i(\tau) \varphi_i^{(k)}(\tau) = 0, \quad k = 1, \dots, n-2; \\ \sum_{i=1}^n \gamma_i(\tau) \varphi_i^{(n-1)}(\tau) = -1. \end{array} \right.$$

Отсюда

$$\gamma_i(\tau) = \frac{\omega_i(\tau)}{\omega(\tau)}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (15)$$

где $\omega(\tau)$ – определитель Вронского фундаментальной системы решений однородного уравнения

$$(14), \quad \omega_i(\tau) – \text{определители, получающиеся из } \omega(\tau) \text{ заменой } i \text{-го столбца столбцом} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ -1 \end{pmatrix}:$$

$$\omega_i(\tau) = \begin{vmatrix} \varphi_1 & \varphi_2 & \cdots & 0 & \cdots & \varphi_n \\ \varphi'_1 & \varphi'_2 & \cdots & 0 & \cdots & \varphi'_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_1^{(n-1)} & \varphi_2^{(n-1)} & \cdots & -1 & \cdots & \varphi_n^{(n-1)} \end{vmatrix}_{t=\tau}.$$

Краевые условия (12) в рассматриваемом случае записываются в виде:

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n \alpha_i(\tau) \varphi_i(t_s) = 0 & s = 1, \dots, k; \\ \sum_{i=1}^n \beta_i(\tau) \varphi_i(t_s) = 0 & s = k+1, \dots, n. \end{cases}$$

Учитывая выражения β_i через γ_i и α_i , приходим к системе

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n \alpha_i(\tau) \varphi_i(t_s) = 0 & s = 1, \dots, k; \\ \sum_{i=1}^n \alpha_i(\tau) \varphi_i(t_s) = \sum_{i=1}^n \gamma_i(\tau) \varphi_i(t_s) & s = k+1, \dots, n. \end{cases} \quad (16)$$

Полагая $u(p_1, \dots, p_n) = \begin{vmatrix} \varphi_1(p_1) & \varphi_2(p_1) & \dots & \varphi_n(p_1) \\ \varphi_1(p_2) & \varphi_2(p_2) & \dots & \varphi_n(p_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_1(p_n) & \varphi_2(p_n) & \dots & \varphi_n(p_n) \end{vmatrix}$, получаем решение системы (16) в виде

$$\alpha_i(\tau) = \frac{u_i}{u(t_1, \dots, t_n)}, \quad i = 1, \dots, n \quad (17)$$

где

$$u_i = \begin{vmatrix} \varphi_1(t_1) & \varphi_2(t_1) & \dots & 0 & \dots & \varphi_n(t_1) \\ \varphi_1(t_2) & \varphi_2(t_2) & \dots & 0 & \dots & \varphi_n(t_2) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_1(t_k) & \varphi_2(t_k) & \dots & 0 & \dots & \varphi_n(t_k) \\ \varphi_1(t_{k+1}) & \varphi_2(t_{k+1}) & \dots & \sum_{j=1}^n \gamma_j(\tau) \varphi_j(t_{k+1}) & \dots & \varphi_n(t_{k+1}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_1(t_n) & \varphi_2(t_n) & \dots & \underbrace{\sum_{j=1}^n \gamma_j(\tau) \varphi_j(t_n)}_{i\text{-й столбец}} & \dots & \varphi_n(t_n) \end{vmatrix}$$

4. Регуляризация

Как уже отмечалось выше, задача (2) относится к классу задач, решения которых неустойчивы к малым изменениям исходных данных.

Для нахождения ее решения применим метод регуляризации А.Н. Тихонова [2]. При этом задача решения интегрального уравнения заменяется задачей минимизации функционала $M^\alpha = \|Au - \tilde{x}\|^2 + \alpha \|\Omega\|^2$, где Ω – стабилизирующий оператор, в настоящей работе взятый в виде

$$\Omega = \int_b^a [p(\tau)u^2(\tau) + q(\tau)u'^2(\tau)] d\tau,$$

α – параметр регуляризации, который определяется из условия минимума невязки и зависит от точности задания правой части уравнения (2).

5. Основные расчетные соотношения

Известно [2–5], что переход к дискретному аналогу нахождения регуляризованных приближенных решений уравнения (2) можно осуществить различными способами. В настоящей работе принят следующий метод: вариационная задача метода невязки дискретизируется конечно-элементными аппроксимациями с последующим анализом уравнения Эйлера дискретной задачи. Решения этой задачи с соответствующим образом подобранным параметром регуляризации и принимается за приближенное решение рассматриваемой задачи.

Подробнее, положим

$$u_n(t) = \sum_{i=0}^n u_i^n \lambda_i(t),$$

где $\lambda_i(t)$ – базис Лагранжа конечно-элементных аппроксимаций [6, 7]. В дальнейшем ограничимся использованием подпространств кусочно-линейных функций, где $\lambda_i(t)$ задаются соотношениями

$$\lambda_i(t) = \begin{cases} 0, & t < t_{i-1} \cup t > t_{i+1}; \\ \frac{t - t_{i-1}}{t_i - t_{i+1}}, & t_{i-1} \leq t \leq t_i; \\ \frac{t - t_{i+1}}{t_i - t_{i+1}}, & t_i < t \leq t_{i+1}. \end{cases}$$

При этом функционал $M^\alpha(u)$ заменится функцией $M^\alpha(u_n(t)) = M^\alpha(u_0, u_1, \dots, u_n)$, где u_i^n – значения функции $u_n(t)$ в узлах

$$M^\alpha = \int_a^b \left[\int_a^b G(t, \tau) \sum_{i=1}^n u_i^n \lambda_i(\tau) d\tau - \tilde{y}(t) \right]^2 dt + \alpha \int_a^b \left[p \left(\sum_{i=1}^n u_i^n \lambda_i(\tau) \right)^2 + q \left(\sum_{i=1}^n u_i^n \lambda'_i(\tau) \right)^2 \right] d\tau.$$

Обозначив через $A_i(t)$ интеграл $\int_a^b G(t, \tau) \lambda_i(\tau) d\tau$, получим

$$\begin{aligned} M^\alpha &= \int_a^b (u_0^n \dots u_n^n) \begin{bmatrix} A_0^2 & \dots & A_0 A_n \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ A_n A_0 & \dots & A_n^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_0^n \\ \vdots \\ u_n^n \end{bmatrix} - 2 \sum_{i=1}^n u_i^n A_i(t) \tilde{y} + \tilde{y}^2 \right] dt + \\ &+ \alpha (u_0^n \dots u_n^n) \begin{bmatrix} \int_a^b (p \lambda_0^2 + q \lambda_0'^2) d\tau & \dots & \int_a^b (p \lambda_0 \lambda_n + q \lambda_0' \lambda_n') d\tau \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \int_a^b (p \lambda_n \lambda_0 + q \lambda_n' \lambda_0') d\tau & \dots & \int_a^b (p \lambda_n^2 + q \lambda_n'^2) d\tau \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u_0^n \\ \vdots \\ u_n^n \end{bmatrix} = \sum_{i,j=0}^n M_{ij} u_i^n u_j^n - 2 \sum_{i=0}^n W_i u_i^n + Y; \\ M_y &= \int_a^b [A_i A_j + \alpha(p \lambda_i \lambda_j + q \lambda_i' \lambda_j')] d\tau, \quad i, j = \overline{0, n}; \\ W_i &= \int_a^b A_i(t) \tilde{y}(t) dt, \quad Y = \int_a^b \tilde{y}^2 dt. \end{aligned}$$

Необходимое условие минимума функционала M^α запишется в виде

$$\frac{\partial M^\alpha}{\partial u_s^n} = \sum_{i=0}^n M_{is} u_i^n - 2W_s = 0, \quad s = 0, 1, 2, \dots, n.$$

В итоге получаем систему ($n+1$) линейных уравнений

$$\sum_{i=0}^n M_{is} u_i^n = 2W_s, \quad s = \overline{0, n},$$

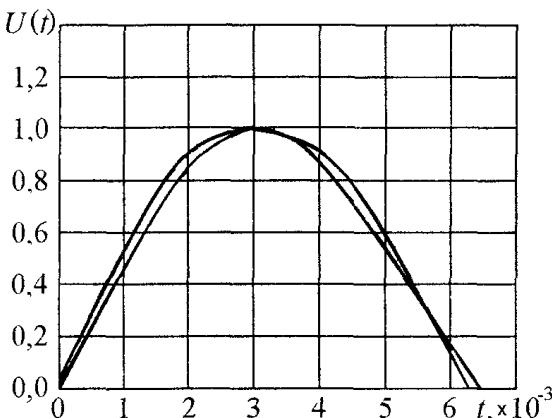
в форме

$$\sum_{i=0}^n u_i^n \cdot 2 \int_a^b \left[\left(\int_a^b G(t, \tau) \lambda_i(\tau) d\tau \right) \left(\int_a^b G(t, \tau) \lambda_s(\tau) d\tau \right) + \alpha (p \lambda_i \lambda_s + q \lambda_i' \lambda_s') \right] d\tau = 2 \int_a^b \tilde{y}(t) \int_a^b G(t, \tau) \lambda_s(\tau) d\tau dt,$$

которая и подлежит решению.

6. Результаты счета

Предлагаемый алгоритм решения задачи восстановления сигнала был опробован на модельном [8] примере датчика второго порядка, описываемого уравнением: $\ddot{x}(t) + a_1 \dot{x}(t) + a_0 x(t) = u(t)$, где $a_0 = 10\ 000$, $a_1 = 100$.



Постоянная времени датчика принималась равной $T = 0,01$, коэффициент демпфирования $\zeta = 0,5$. При моделировании на вход датчика подавался импульсный сигнал в виде полуволны синусоиды $u(t) = \sin 500t$. На выходе датчика дополнительно присутствовало приведенное гармоническое одночастотное шумовое воздействие $v(t) = 0,05 \sin 5000t$.

На рисунке приведены результаты восстановления функции $u(t)$ ($n = 100$).

Работа выполнена при частичной поддержке гранта РФФИ-УРАЛ 04-01-96073.

Литература

1. Наймарк М.А. Линейные дифференциальные операторы. – М.: Наука, 1969.
2. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1986.
3. Иванов В.К., Васин В.В., Танана В.П. Линейные некорректные задачи и их приложения. – М.: Наука, 1978.
4. Гончарский А.В., Черепашук А.М., Ягода А.Г. Численные методы решения обратных задач астрофизики. – М.: Наука, 1978.
5. Лоусон Ч., Хенсон Р. Численное решение задач метода наименьших квадратов. – М.: Наука, 1986.
6. Деклу Ж. Метод конечных элементов. – М.: Мир, 1976.
7. Зенкевич О. Метод конечных элементов в технике. – М.: Мир, 1975.
8. Грановский В.А. Динамические измерения. – Л.: Энергоатомиздат, 1984.
9. Верлань А.Ф., Сизиков В.С. Методы решения интегральных уравнений с программами для ЭВМ. – Киев: Наукова думка, 1978.

Поступила в редакцию 13 декабря 2004 г.

МЕТОД СИМПЛЕКТИЧЕСКОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ УРАВНЕНИЙ ДВИЖЕНИЯ МАЛЫХ ТЕЛ СОЛНЕЧНОЙ СИСТЕМЫ

Е.А. Чегодаева

В статье предложен метод симплектического интегрирования. На основе его создан симплектические интеграторы разных порядков и проведено их тестирование.

В последнее десятилетие методы симплектического интегрирования стали основным инструментом при исследовании гамильтоновых систем на больших промежутках времени. Связано это с тем, что при значительно большем быстродействии по сравнению с классическими методами эти методы сохраняют основные свойства гамильтоновых систем. Поэтому использование симплектических интеграторов создало предпосылки для решения таких сложных задач, как изучение закономерностей движения малых тел в течение промежутка времени порядка возраста Солнечной системы. Однако прямое применение методов симплектического интегрирования в динамике малых тел Солнечной системы является затруднительным в случае больших эксцентрикитетов орбит и наличия тесных сближений с планетами. В данной статье предложен эффективный метод симплектического интегрирования, пригодный для широкого класса орбит.

Рассмотрим основы теории симплектических интеграторов для канонических уравнений движения с гамильтонианом H для системы N тел [1, 12].

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial x_i}, \quad (1)$$

где $i = 1, 2, \dots, N$, $\vec{x} = (x_1, x_2, x_3)$ – обобщенная координата, $\vec{p} = (p_1, p_2, p_3)$ – обобщенный импульс.

Используя (1), скорость изменения любой динамической величины $\vec{q}(\vec{x}, \vec{p}, t)$ может быть записана в виде

$$\frac{d\vec{q}}{dt} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \vec{q}}{\partial x_i} \frac{dx_i}{dt} + \frac{\partial \vec{q}}{\partial p_i} \frac{dp_i}{dt} \right) = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \vec{q}}{\partial x_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} + \frac{\partial \vec{q}}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial x_i} \right) \equiv \{\vec{q}, H\} \equiv F\vec{q}, \quad (2)$$

где $\{\cdot, \cdot\}$ – скобки Пуассона, F – дифференциальный оператор вида

$$F = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial x_i} \right). \quad (3)$$

Общее решение уравнения (2) имеет вид

$$\vec{q}(t) = e^{\tau F} \vec{q}(t - \tau), \quad (4)$$

где $\vec{q}(t - \tau)$ значение \vec{q} в предыдущий момент времени.

Предположим, что $H = H_A + \varepsilon H_B$, где H_A и H_B являются интегрируемыми гамильтонианами. Симплектический интегратор второго порядка может быть записан в виде

$$\vec{q}(t) = e^{\tau \varepsilon B/2} e^{\tau A} e^{\tau \varepsilon B/2} \vec{q}(t - \tau), \quad (5)$$

где τ – шаг интегрирования, а A и B – дифференциальные операторы вида F для гамильтонианов H_A и H_B соответственно.

Каждый шаг интегрирования для схемы (2) состоит из трех подшагов.

- 1) полшага решение канонических уравнений движения с гамильтонианом H_B .
- 2) шаг решение канонических уравнений движения с гамильтонианом H_A .
- 3) полшага решение канонических уравнений движения с гамильтонианом H_B .

Применение симплектических интеграторов равносильно точному решению уравнений движения (1) с гамильтонианом H_{integ} [2]:

$$H_{\text{integ}} = H + H_{\text{err}}(\tau^P), \quad (6)$$

где $H_{\text{еп}}$ – член, возникающий из-за некоммутативности операторов A и B , p – порядок интегратора. Интеграторы порядка выше второго намного более громоздкие, а так же имеют неудобства в виде отрицательных подшагов, поэтому чаще всего используются интеграторы второго порядка как достаточно эффективные и быстрые. Однако есть другие способы повысить точность симплектического интегратора – интеграторы псевдовысокого порядка [2, 5] и корректоры [7, 9, 11]. Интеграторы псевдовысокого порядка получают из $S_2(\tau)$, разделяя экспоненты специальным образом [5]. Например,

$$S_6(\tau) = e^{d_1 \tau B} e^{c_2 \tau A} e^{d_2 \tau B} e^{c_1 \tau A} e^{d_2 \tau B} e^{c_2 \tau A} e^{d_1 \tau B}, \quad (7)$$

$$c_1 = \frac{1}{\sqrt{5}}, c_2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\sqrt{5}} \right), d_1 = \frac{1}{12}, d_2 = \frac{5}{12}.$$

Интегрируемый гамильтониан для этой схемы $H_{\text{integr}} = H + \varepsilon^2 \tau^2 \left(\frac{13-5\sqrt{5}}{288} \right) \{ \{ H_A, H_B \}, H_B \} + O(\varepsilon \tau^6)$.

Ласкар и Робутель [5] представляют общий вид коэффициентов через полиномы Бернулли, позволяя найти схему интегратора для любого псевдовысокого порядка. Эти интеграторы тратят больше компьютерного времени, но имеют более высокую точность, поэтому можно увеличить шаг интегрирования. Чемберс и Морисон [2] считают, что интегратор псевдовысокого порядка наиболее эффективен.

При разделении гамильтониана на части и выборе системы координат возможны варианты. Обычное разделение гамильтониана на части – это разделение на кеплерову часть, отвечающую за движение объекта по орбите, и возмущающую часть. Запишем гамильтониан для системы N тел в инерциальной системе отсчета

$$H(q_i, p_i) = \sum_{i=0}^N \frac{p_i^2}{2m_i} - G \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{m_i m_j}{|q_i - q_j|}, \quad (8)$$

где \vec{q}_i – обобщенные координаты, \vec{p}_i – обобщенные импульсы, m_i – масса i -го тела, $i=0$ соответствует Солнцу. Висдом и Холман [8] в своем интеграторе использовали координаты Якоби. Можно также использовать гелиоцентрическую систему координат, барицентрическую [4], смешанную [3]. Левисон, Дункан, Ли [3] предложили использовать смешанную систему координат. Такая система координат удобна для исследования объектов имеющих тесные сближения. Координаты Q_i – гелиоцентрические, а импульсы P_i – барицентрические:

$$Q_i = \begin{cases} q_i - q_0, & \text{если } i \neq 0, \\ \frac{1}{M} \sum_{j=0}^n m_j q_j, & \text{если } i = 0, \end{cases} \quad P_i = \begin{cases} p_i - \frac{m_i}{M} \sum_{j=0}^n p_j, & \text{если } i \neq 0, \\ \sum_{j=0}^n p_j, & \text{если } i = 0, \end{cases} \quad (9)$$

где $M = \sum_{i=0}^n m_i$. Тогда (17) имеет вид $H(Q_i, P_i) = H_{\text{Kepl}} + H_{\text{Sun}} + H_{\text{Inter}}$, где

$$H_{\text{Kepl}} = \sum_{i=1}^n \left(\frac{|P_i|^2}{2} \left(\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_0} \right) - \frac{G m_i m_0}{|Q_i|} \right), \quad (10)$$

$$H_{\text{Sun}} = \frac{1}{m_0} \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=1, j \neq i}^n P_i P_j, \quad (11)$$

$$H_{\text{Inter}} = - \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n \frac{G m_i m_j}{|Q_i - Q_j|}. \quad (12)$$

Для такого гамильтониана, разделенного на три части, схема симплектического интегрирования второго порядка имеет вид [3]

$$S_2(\tau) = e^{\tau C/2} e^{\tau B/2} e^{\tau A} e^{\tau B/2} e^{\tau C/2}, \quad (13)$$

где A, B, C – операторы соответственно для $H_{\text{Kepl}}, H_{\text{Inter}}, H_{\text{Sun}}$. При симплектическом интегрировании шаг интегрирования по независимой переменной является постоянным. Так в симплектическом интеграторе Висдома и Холмана [8] временной шаг интегрирования является постоян-

ным, что не всегда приемлемо для решения задач небесной механики. Для решения задач связанных с кометами, астероидами и другими малыми телами Солнечной системы более удобен интегратор с переменным временным шагом. Емельяненко [4] предложены преобразования, позволяющие сделать шаг переменным.

Интегратор в смешанных координатах для кометных орбит, разработанный в нашей работе, основан на методе Левисона, Дункана и Ли [3], упомянутом выше, и методе переменного временного шага Емельяненко [4].

В программе производится симплектическое интегрирования отдельно для планет и отдельно для частиц, что экономит компьютерное время. Система смешанных координат, гамильтониан и схема интегрирования для планет описываются формулами (9)–(13). Симплектическое интегрирование планет идет с постоянным временным шагом.

Найдем гамильтониан для частицы в смешанных координатах. Для этого перепишем (8) в виде

$$H(q_i, p_i, \vec{q}_m, \vec{p}_m) = \sum_{i=0}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m_i} + \frac{\vec{p}_m^2}{2m_m} - k^2 \sum_{i=0}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{m_i m_j}{|q_i - q_j|} - k^2 \sum_{i=0}^N \frac{m_i m_m}{|\vec{q}_m - q_i|}, \quad (14)$$

где m – индекс частицы. Переходим к смешанным координатам, используя (9) для планет, а для частицы

$$\vec{Q}_m = \vec{q}_m - q_0, \quad (15)$$

$$\vec{P}_m = m_m \vec{V}_m = m_m \vec{v}_m - \frac{1}{M} \sum_{j=0}^{n,m} p_j. \quad (16)$$

Центр масс ($i = 0$) движется как свободная частица, в гамильтониане его не учитываем. Выпишем из гамильтониана системы части, относящиеся к частице:

$$H(\vec{Q}_m, \vec{V}_m) = \frac{m_m \vec{V}_m^2}{2} + \frac{m_m^2 \vec{V}_m^2}{2m_0} - \sum_{i=0}^n \frac{k^2 m_i m_m}{|\vec{Q}_m - Q_i|} + \frac{1}{m_0} m_m \vec{V}_m \sum_{i=1}^n \vec{P}_i. \quad (17)$$

На m_m можно сократить, после чего считаем $m_m = 0$. В результате чего получаем гамильтониан $H = H_{\text{Kepl}} - H_{\text{Sun}} - H_{\text{Inter}}$

$$H_{\text{Kepl}} = \frac{|\vec{V}_m|^2}{2} - \frac{k^2 m_0}{|\vec{Q}_m|}, \quad (18)$$

$$H_{\text{Sun}} = -\frac{1}{m_0} \vec{V}_m \sum_{i=1}^n \vec{P}_i(t), \quad (19)$$

$$H_{\text{Inter}} = \sum_{i=1}^n \frac{k^2 m_i}{|\vec{Q}_m - Q_i(t)|}. \quad (20)$$

Для данного гамильтониана применим преобразования Емельяненко [4]. Расширяем фазовое пространство, введем канонические переменные $q_4 = t$ и $p_4 = -H$. Затем, следуя Микколе [6], определим новую независимую переменную τ соотношением, $d\tau = dt/r$. Тогда уравнения движения имеют вид:

$$\frac{dq_i}{d\tau} = \frac{\partial K}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{d\tau} = -\frac{\partial K}{\partial q_i}, \quad (21)$$

где $i = 1, 2, 3, 4$, а $K = r(H_{\text{Kepl}} + p_4) - r(H_{\text{Inter}} - H_{\text{Sun}})$. Добавим выражение $rB_0 + B_1 > 0$ к обеим частям гамильтониана K (B_0, B_1 – некие малые константы). Тогда $K = K_0 - K_1$, где

$$K_0 = r \left(H_{\text{Kepl}} + p_4 + B_0 + \frac{B_1}{r} \right), \quad K_1 = r \left(H_{\text{Inter}} + H_{\text{Sun}} + B_0 + \frac{B_1}{r} \right), \quad (22)$$

и $K = 0$ на траектории движения. Далее применяем преобразование, предложенное Микколой и Таниковой [6],

$$ds = K_1 d\tau = K_0 d\tau = \frac{K_0}{r} dt, \quad (23)$$

после которого уравнения движения можно записать в следующем виде:

$$\frac{d\vec{Q}_m}{ds} = \frac{\partial \Gamma}{\partial \vec{V}_m}, \frac{d\vec{V}_m}{ds} = -\frac{\partial \Gamma}{\partial \vec{Q}_m}, \quad (24)$$

$$\frac{dq_4}{ds} = \frac{\partial \Gamma}{\partial p_4}, \frac{dp_4}{ds} = -\frac{\partial \Gamma}{\partial q_4}, \quad (25)$$

с новым гамильтонианом

$$\Gamma = \Gamma_0 + \Gamma_1, \quad (26)$$

где $\Gamma_0 = \ln \frac{K_0}{r}$, $\Gamma_1 = -\ln \frac{K_1}{r}$.

Получается, что для гамильтониана Γ можно применить симплектическое интегрирование и при этом шаг интегрирования для частицы будет зависеть от ее расстояния до Солнца и планет. Из-за того, что Γ_1 зависит как от \vec{Q}_m , так и от \vec{P}_m возникают сложности в решении системы дифференциальных уравнений. Алгоритм интегратора второго порядка может быть записан в виде

$$E_1(h_s/2)E_0(h_s)E_1(h_s/2), \quad (27)$$

где E_0 и E_1 – операторы эволюции Γ_0 и Γ_1 соответственно, h_s – длина шага для новой переменной s . Во время симплектического интегрирования $\Gamma_0 \approx \Gamma_1$ и, соответственно, $K_0 \approx K_1$. Тогда уравнение (25) имеет вид

$$dt \approx \frac{rds}{K_0} = \frac{ds}{H_{\text{kepl}} + p_4 + B_0 + \frac{B_1}{r}}. \quad (28)$$

Для возмущенной части решается система дифференциальных уравнений

$$\frac{d\vec{Q}_m}{ds} = \frac{\partial \Gamma_1}{\partial \vec{V}_m} = \frac{1}{Cm_0} \sum_{i=1}^n \vec{P}_i(t), \quad (29)$$

$$\frac{d\vec{V}_m}{ds} = -\frac{\partial \Gamma_1}{\partial \vec{Q}_m} = -\frac{1}{C} \left(k^2 \sum_{i=1}^n \frac{m_i(\vec{Q}_m - \vec{Q}_i(t))}{|\vec{Q}_m - \vec{Q}_i(t)|^3} + B_1 \frac{\vec{Q}_m}{|\vec{Q}_m|^3} \right), \quad (30)$$

$$\frac{dt}{ds} = -\frac{\partial \Gamma_1}{\partial p_4} = 0 \Rightarrow t = \text{const}, \quad (31)$$

$$\frac{dp_4}{ds} = -\frac{\partial \Gamma_1}{\partial t} = \frac{1}{C} \left(-\frac{1}{m_0} \vec{V}_m \sum_{i=1}^n \frac{d\vec{P}_i(t)}{dt} + \sum_{i=1}^n \frac{k^2 m_i (\vec{Q}_m - \vec{Q}_i(t))}{|\vec{Q}_m - \vec{Q}_i(t)|^3} \frac{d\vec{Q}_i(t)}{dt} \right), \quad (32)$$

где $C = \frac{K_1}{r}$ константа

$\vec{P}_i(t)$ и $\vec{Q}_i(t)$ известны для определенных моментов времени, связанных с шагом интегрирования планет. Для каждой частицы проводится дополнительное вычисление координат планет, основанное на следующем принципе:

1) решаем уравнения для кеплеровой части планет с шагом по времени $\delta t = T_{\text{part}} - T_{\text{pl}}$, где T_{part} – время для которого должны быть найдены новые координаты планет, T_{pl} – время в которое координаты уже найдены,

2) зная шаг интегрирования планет Δt , находим $\Delta T = T_{\text{part}} - T_{\text{pl}} + \Delta t/2$ и решаем уравнения движения для гамильтонианов (12) и (11) с шагом по времени ΔT , находя таким образом нужные нам координаты и импульсы планет:

$$\frac{d\vec{Q}_i(t)}{dt} = \frac{1}{m_0} \sum_{j=1, j \neq i}^n \vec{P}_j + \vec{P}_i \left(\frac{1}{m_i} + \frac{1}{m_0} \right), \quad (33)$$

$$\frac{d\vec{P}_i(t)}{dt} = -\sum_{j=1}^n \frac{k^2 m_i m_j (\vec{Q}_i - \vec{Q}_j)}{|\vec{Q}_i - \vec{Q}_j|^3} - \frac{k^2 m_i m_0 \vec{Q}_i}{|\vec{Q}_i|^3}, \quad (34)$$

Для возмущенной части (29) – (32) выражения получаются громоздкими, на которые тратится довольно много компьютерного времени – это один из минусов смешанного интегратора. Второй минус интегратора в смешанных координатах – это довольно большое изменение части гамильтониана H_{Sun} . В некоторых случаях выражение под знаком логарифма может стать даже отрицательным. Чтобы этого избежать, надо определить интервал изменения H_{Sun} и подобрать коэффициенты B_0, B_1 . Принцип выбора параметров B_0, B_1 следующий: если частица далеко от планет, то

$$|R| \ll B_0 + \frac{B_1}{r}, |R| > B_0 + \frac{B_1}{r} \quad (35)$$

при тесных сближениях с планетами. Значит, если взять большое значение $B_0 + B_1/r$, то это скомпенсирует изменение H_{Sun} , шаг интегрирования по времени при тесных сближениях будет меняться незначительно. Это означает, что для полученного интегратора нужно очень тщательным образом контролировать параметры интегратора для каждого класса орбит. В этом состоит главный недостаток интегратора в смешанных координатах.

Для того чтобы разработать интегратор с большей областью применения будем использовать барицентрическую систему координат для частиц. Для интегрирования уравнений движения планет будем использовать смешанную систему координат (9)–(11). В данном случае эта система координат наиболее удобна. Для частиц опять используется метод симплектического интегрирования с переменным временным шагом Емельяненко [3]. Гамильтониан имеет следующий вид $H = H_0 - H_1$, где

$$H_0 = \frac{\vec{v}_m^2}{2} - \frac{k^2(1 + \sum_{i=1}^n m_i)}{r}, \quad (36)$$

$$H_1 = \sum_{i=0}^n k^2 m_i \left(\frac{1}{|\vec{q}_m - \vec{q}_i(t)|} - \frac{1}{r} \right), \quad (37)$$

где $r = |\vec{q}_m|$.

Для решения кеплеровой части переходим от ds к dt и решаем задачу двух тел с новым гамильтонианом

$$\Gamma'_0 = \frac{\vec{v}_m^2}{2} - \frac{k^2(1 + \sum_{i=1}^n m_i) + C_0 - B_1}{r} + B_0 + p_4, \quad (38)$$

где C_0 константа K_0 .

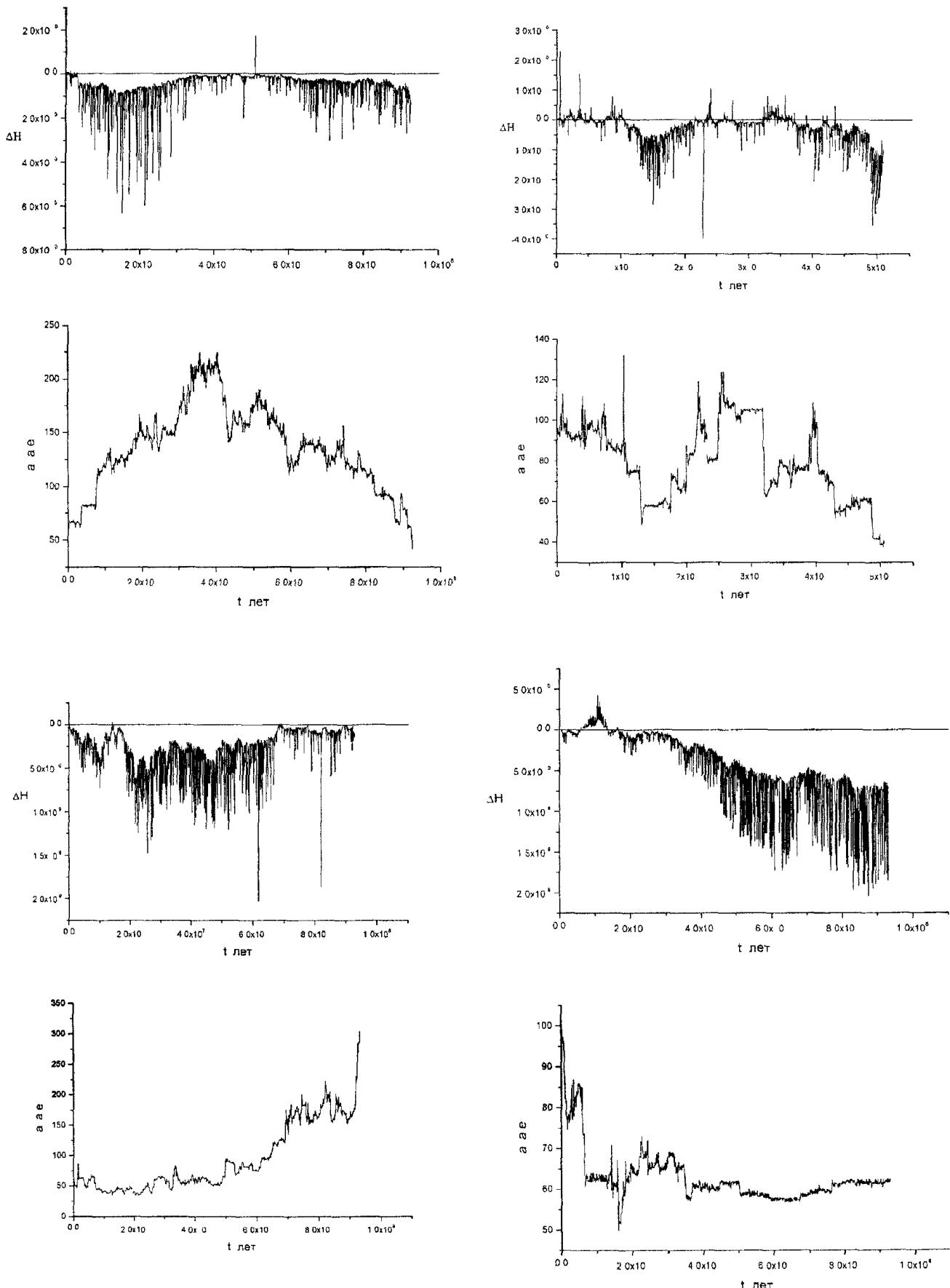
Численные эксперименты

Для тестирования интеграторов были взяты две орбиты с большими полуосями $a_1 = 60,91$ а.е. и $a_2 = 97,12$ а.е., перигелийными расстояниями $q_1 = 30,01$ а.е. и $q_2 = 30,2$ а.е., эксцентриситетами $e_1 = 0,50$, $e_2 = 0,68$, наклонами орбит $i_1 = 16^\circ$, $i_2 = 13^\circ$. Частицы в начальный момент времени находятся на расстоянии 91 и 96 а.е. от Солнца соответственно. В интегрировании участвуют только 4 внешние планеты: Юпитер, Сатурн, Уран и Нептун. Шаг интегрирования для планет равен 365 дней.

Тестированию были подвергнуты симплектический интегратор второго порядка, комбинирующий смешанные и барицентрические координаты, описанный выше и интегратор псевдошестого порядка. Для построения последнего использовался интегратор, комбинирующий смешанные и барицентрические координаты. Схема интегратора псевдошестого порядка задана уравнением (7). Интегратор основан на уравнениях (36)–(38). Для обеих частиц B_0, B_1 подобраны на основе соотношений (35): $B_0 = 0, B_1 = 0,21 \cdot 10^{-6}$. Для интегратора второго порядка начальные шаги по времени для частиц составляли 298 и 310 дней соответственно, для интегратора псевдошестого порядка начальные шаги интегрирования равны 910 дней и 953 дня соответственно. Тестирование интеграторов было проведено на интервале 100 млн лет. Время, затраченное процессором на интегратор второго порядка примерно на 5% меньше времени затраченного на интегратор псевдошестого порядка.

Математика

На рисунке левая колонка сверху вниз представляет зависимости ошибок ΔH и большой полуоси a от времени для первой частицы симплектического интегратора второго порядка, затем те же зависимости для симплектического интегратора псевдошестого порядка Графики справа соответствуют тем же зависимостям для второй тестируемой частицы. Результаты представлены



Зависимости ошибок ΔH и большой полуоси a от времени для первой и второй частицы симплектического интегратора второго порядка и симплектического интегратора псевдошестого порядка

таким образом, чтобы перигелийное расстояние частиц удовлетворяло условию $q > 26$ а.е. Для орбит с $q < 26$ а.е. должны быть другие коэффициенты B_0, B_1 . Как видно на рисунке, точность интегратора второго порядка сохраняется на протяжении всего времени интегрирования частиц. Для псевдошестого порядка видно, особенно для второй частицы, накопление ошибок в гамильтониане. Очевидно, это связано с очень большим шагом интегрирования. Известно, что шаг интегрирования не может превышать 400 дней, ограничение, связанное с периодом обращения Юпитера. Кроме того, интегратор псевдошестого порядка требует больше компьютерного времени, чем интегратор второго порядка.

Заключение. Разработаны методы симплектического интегрирования для кометных орбит. На основе данных методов построены три интегратора. Интегратор, в котором для планет и для частиц используются смешанные координаты, не является универсальным интегратором для кометных орбит, но вполне возможно его применение для определенных классов орбит. Применение смешанных координат для массивных объектов является эффективным выбором системы координат. Интегратор, комбинирующий смешанные координаты для планет и барицентрические координаты для частицы, отлично зарекомендовал себя объектов внешней части Солнечной системы.

Данная работа была поддержанна грантами РФФИ-Урал (04-02-96042) и ИНТАС (00-240).

Литература

1. Chambers J.E. A hybrid symplectic integrator that permits close encounters between massive bodies// Mon. Not. Roy. Astron. Soc. – 1999. – V. 304. – P. 793–799.
2. Chambers J.E., Murison M.A. Pseudo-high-order symplectic integrators// The Astronomical Journal. – 2000. – V. 119. – P. 425–433.
3. Duncan M., Levison H. and Lee M.A multiple time step symplectic algorithm for integrating close encounters// The Astronomical Journal. – 1998. – P. 2067–2077.
4. Emel'yanenko V. An explicit symplectic integrator for cometary orbits// Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy. – 2001. – V. 74. – P. 287–295.
5. Laskar J., Robutel P. High order symplectic integrators for perturbed hamiltonian systems// Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy. – 2001. – V. 80. – P. 39–62.
6. Mikkola S., Tanikawa K. Explicit symplectic algorithms for time-transformed Hamiltonians // Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy. – 1999. – P. 287–295.
7. Mikkola S., Palmer H. Simple derivation of symplectic integrators with first order correctors// Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy. – 2000. – V. 77. – P. 305–307.
8. Wisdom J., Holman M. Symplectic maps for the N-body problem// The Astronomical Journal. – 1991. – P. 1528–1538.
9. Wisdom J., Holman M., Touma J. Symplectic correctors. Integration algorithms and classical mechanics// Fields Instituts Community. – 1996. – P. 217–244.
10. Wu X., Huang T.Y., Wan X.S. On correctors of symplectic integrators// Chinese Astronomy and Astrophysics. – 2003. – V. 27. – P. 114–125.
11. Wu X., Huang T.Y., Zhang H., Wan X.S. A note on the algorithm of symplectic integrators// Astrophysics and Space Science. – 2003. – V. 283. – P. 53–65.
12. Yohida H. Construction of higher order symplectic integrators// Physics letters A. – 1990. – V. 150. – P. 262–268.

Поступила в редакцию 10 сентября 2004 г.

ПЕРИОД СУММЫ ДВУХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ

А.Ю. Эвнин

В работе полностью решен вопрос, каким может быть основной период периодической функции, являющейся суммой двух периодических функций с известными основными периодами. Изучается также случай отсутствия основного периода у периодической суммы периодических функций.

Мы рассматриваем действительнозначные функции действительного переменного.

В энциклопедическом издании [1] в статье «Периодические функции» можно прочитать: «Сумма периодических функций с разными периодами является периодической только тогда, когда их периоды соизмеримы». Это утверждение справедливо для непрерывных функций¹, но не имеет места в общем случае. Контрпример весьма общего вида был построен в [4]. В данной статье мы выясняем, каким может быть основной период периодической функции, являющейся суммой двух периодических функций с известными основными периодами.

Предварительные сведения

Напомним, что функция f называется *периодической*, если для некоторого числа $T \neq 0$ при любом x из области определения $D(f)$ числа $x + T$ и $x - T$ принадлежат $D(f)$ и выполняются равенства $f(x + T) = f(x) = f(x - T)$. При этом число T называют *периодом* функции.

Наименьший положительный период функции (если, конечно, он существует) будем называть *основным периодом*. Известен следующий факт.

Теорема 1. *Если у функции есть основной период T_0 , то любой период функции имеет вид nT_0 , где $n \neq 0$ – целое число.*

Числа T_1 и T_2 называют *соизмеримыми*, если существует такое число T_0 , которое целое число раз «укладывается» и в T_1 , и в T_2 : $T_1 = n_1 T_0$, $T_2 = n_2 T_0$, $n_1, n_2 \in \mathbb{Z}$. В противном случае числа T_1 и T_2 называют *несоизмеримыми*. Соизмеримость (несоизмеримость) периодов означает, таким образом, что их отношение есть число рациональное (иррациональное).

Из теоремы 1 следует, что у функции, имеющей основной период, любые два периода соизмеримы.

Классическим примером функции, не имеющей наименьшего периода, является *функция Дирихле*, равная 1 в рациональных точках, и нулю – в иррациональных. Любое рациональное число, отличное от нуля, является периодом функции Дирихле, а любое иррациональное число не является ее периодом. Как видим, и здесь любые два периода соизмеримы.

Приведем пример непостоянной периодической функции, имеющей несоизмеримые периоды.

Пусть функция $f(x)$ в точках вида $m + n\sqrt{2}$, $m, n \in \mathbb{Z}$, равна 1, а в остальных точках равна нулю. Среди периодов этой функции есть 1 и $\sqrt{2}$.

Период суммы функций с соизмеримыми периодами

Теорема 2. *Пусть f и g – периодические функции с основными периодами mT_0 и nT_0 , где m и n – взаимно простые числа. Тогда основной период их суммы (если он существует), равен $\frac{mnT_0}{k}$, где k – натуральное число, взаимно простое с числом mn .*

Доказательство. Пусть $h = f + g$. Очевидно, что число mnT_0 является периодом h . В силу теоремы 1 основной период h имеет вид $\frac{mnT_0}{k}$, где k – некоторое натуральное число. Предположим, что k не является взаимно простым с числом mn , то есть $k = dk_1$, $mn = dm_1$, где $d > 1$ – наи-

¹ Красивое доказательство того, что сумма любого конечного числа непрерывных функций с попарно несоизмеримыми периодами непериодична, содержится в статье [2]. См. также [3].

больший общий делитель чисел m и k . Тогда период функции h равен $\frac{m_1 n T_0}{k_1}$, а функция $f = h - g$

имеет период $m_1 n T_0$, не являющийся кратным ее основного периода $m T_0$. Получено противоречие с теоремой 1. Значит, k взаимно просто с m . Аналогично, взаимно простыми являются числа k и n . Таким образом, k взаимно просто с mn . \square

Теорема 3. Пусть m , n и k – попарно взаимно простые числа, а T_0 – положительное число. Тогда существуют такие периодические функции f и g , что основные периоды f , g и $(f + g)$ равны соответственно $m T_0$, $n T_0$ и $\frac{m n T_0}{k}$.

Доказательство. Доказательство теоремы будет конструктивным: мы просто построим соответствующий пример. Предварительно сформулируем следующий результат.

Утверждение. Пусть $m \neq n$ – взаимно простые числа. Тогда функции

$$f_1 = \cos \frac{x}{m} + \cos \frac{x}{n} \quad \text{и} \quad f_2 = \cos \frac{x}{m} - \cos \frac{x}{n} \quad \text{имеют основным периодом число } 2\pi mn.$$

Доказательство утверждения. Очевидно, что число $2\pi mn$ является периодом обеих функций. Легко можно проверить, что этот период основной для функции f_1 . Найдем ее точки максимума.

$$f_1(x) = 2 \Leftrightarrow \begin{cases} \cos \frac{x}{m} = 1 \\ \cos \frac{x}{n} = 1 \end{cases} \Leftrightarrow \begin{cases} x = 2\pi ms, & s \in \mathbb{Z} \\ x = 2\pi nt, & t \in \mathbb{Z}. \end{cases}$$

Имеем $ms = nt$. Из взаимной простоты m и n следует, что s кратно n , т.е. $s = nl$, $l \in \mathbb{Z}$. Значит, $f_1(x) = 2 \Leftrightarrow x = 2\pi mnl$, $l \in \mathbb{Z}$, а расстояние между соседними точками максимума функции f_1 равно $2\pi mn$, и положительный период f_1 не может быть меньше числа $2\pi mn$.

Для функции f_2 применим рассуждения другого рода (которые подходят и для функции f_1 , но менее элементарны). Как показывает теорема 1, основной период T функции f_2 имеет вид $\frac{2\pi mn}{k}$, где k – некоторое натуральное число, взаимно простое с m и n . Число T будет и периодом функции

$$m^2 f_2'' + f_2 = \left(\frac{m^2}{n^2} - 1 \right) \cos \frac{x}{n},$$

все периоды которой имеют вид $2\pi nl$. Итак, $\frac{2\pi mn}{k} = 2\pi nl$, т.е. $m = kl$. Так как m и k взаимно просты, отсюда следует, что $k = 1$.

Теперь для доказательства теоремы 3 можно построить искомый пример.

Пример. Пусть m , n и k – попарно взаимно простые числа и хотя бы одно из чисел n или k отлично от 1. Тогда $n \neq k$ и в силу доказанного утверждения функции

$$f(x) = \cos \frac{x}{m} + \cos \frac{x}{k} \quad \text{и} \quad g(x) = \cos \frac{x}{n} - \cos \frac{x}{k}$$

имеют основные периоды $2\pi mk$ и $2\pi nk$ соответственно, а у их суммы

$$h(x) = f(x) + g(x) = \cos \frac{x}{m} + \cos \frac{x}{n}$$

основной период равен $2\pi mn$.

Если же $n = k = 1$, то подойдет пара функций

$$f(x) = 2 \cos \frac{x}{m} + \cos x \quad \text{и} \quad g(x) = \cos x.$$

Их основные периоды, а также период функции $h(x) = 2 \left(\cos \frac{x}{m} + \cos x \right)$, как легко проверить, равны соответственно $2\pi m$, 2π и $2\pi mn$.

Обозначим $T = 2\pi k$. Для произвольных попарно взаимно простых чисел m, n и k указаны функции f и g такие, что основные периоды функций f, g и $f + g$ равны соответственно mT, nT и $\frac{mnT}{k}$. Условию теоремы удовлетворяют функции $f\left(\frac{T}{T_0}x\right)$ и $g\left(\frac{T}{T_0}x\right)$.

Период суммы функций с несоизмеримыми периодами

Следующее утверждение почти очевидно.

Теорема 4. Пусть f и g – периодические функции с несоизмеримыми основными периодами T_1 и T_2 , а сумма этих функций $h = f + g$ периодична и имеет основной период T . Тогда число T несоизмеримо ни с T_1 , ни с T_2 .

Доказательство. С одной стороны, если числа T и T_1 соизмеримы, то функция $g = h - f$ имеет период, соизмеримый с T_1 . С другой стороны, в силу теоремы 1 любой период функции g кратен числу T_2 . Получаем противоречие с несоизмеримостью чисел T_1 и T_2 . Несоизмеримость чисел T и T_2 доказывается аналогично. \square

Замечательным, и даже в некотором роде удивительным, является тот факт, что справедливо и утверждение, обратное к теореме 4. Широко распространено заблуждение о том, что сумма двух периодических функций с несоизмеримыми периодами не может быть функцией периодической. На самом же деле это не так. Более того, период суммы может быть любым положительным числом, удовлетворяющим утверждению теоремы 4.

Теорема 5. Пусть T_1, T_2 и T – попарно несоизмеримые положительные числа. Тогда существуют такие периодические функции f и g , что их сумма $h = f + g$ периодична, а основные периоды функций f, g и h равны соответственно T_1, T_2 и T .

Доказательство. Доказательство вновь будет конструктивным. Наши построения будут существенно зависеть от того, представимо или не представимо число T в виде рациональной комбинации $T = \alpha T_1 + \beta T_2$ (α и β – рациональные числа) периодов T_1 и T_2 .

I. T не является рациональной комбинацией T_1 и T_2 .

Пусть $A = \{mT_1 + nT_2 + kT \mid m, n, k \in \mathbb{Z}\}$ – множество целых линейных комбинаций чисел T_1, T_2 и T . Отметим сразу, что если число представимо в виде $mT_1 + nT_2 + kT$, то такое представление единствено. Действительно, если $m_1T_1 + n_1T_2 + k_1T = m_2T_1 + n_2T_2 + k_2T$, то

$$(k_1 - k_2)T = (m_2 - m_1)T_1 + (n_2 - n_1)T_2,$$

и при $k_1 \neq k_2$ получаем, что T рационально выражается через T_1 и T_2 . Значит, $k_1 = k_2$. Теперь из несоизмеримости чисел T_1 и T_2 непосредственно получаются равенства $m_1 = m_2$ и $n_1 = n_2$.

Важным является тот легко проверяемый факт, что множества A и дополнение к нему \bar{A} замкнуты относительно прибавления чисел из A : если $x \in A$ и $y \in A$, то $x + y \in A$; если $x \in \bar{A}$ и $y \in A$, то $x + y \in \bar{A}$.

Положим, что во всех точках множества \bar{A} функции f и g равны нулю, а на множестве A зададим эти функции следующим образом:

$$\begin{aligned} f(mT_1 + nT_2 + kT) &= nT_2 + kT, \\ g(mT_1 + nT_2 + kT) &= mT_1 - kT. \end{aligned}$$

Поскольку, как было показано, по числу $x \in A$ коэффициенты m, n и k линейной комбинации периодов T_1, T_2 и T восстанавливаются однозначно, указанные задания функций f и g корректны.

Функция $h = f + g$ на множестве \bar{A} равна нулю, а в точках множества A равна

$$h(mT_1 + nT_2 + kT) = mT_1 + nT_2.$$

Непосредственной подстановкой легко убедиться, что число T_1 – период функции f , число T_2 – период g , а T – период h . Покажем, что эти периоды – основные.

Сначала отметим, что любой период функции f принадлежит множеству A . Действительно, если $0 \neq x \in A, y \in \bar{A}$, то $x + y \in \bar{A}$ и $f(x + y) = 0 \neq f(x)$. Значит, $y \in \bar{A}$ – не период функции f .

Пусть теперь не равные друг другу числа x_1, x_2 принадлежат A и $f(x_1) = f(x_2)$. Из определения функции f отсюда получаем, что $x_1 - x_2 = lT_1$, где l – некоторое ненулевое целое число. Стало быть, любой период функции f кратен T_1 . Таким образом, T_1 – действительно основной период f .

Точно так же проверяются утверждения относительно T_2 и T .

Замечание. В книге [4] на с. 172–173 приводится другая общая конструкция для случая I.

II. T – рациональная комбинация T_1 и T_2 .

Представим рациональную комбинацию периодов T_1 и T_2 в виде $T = \frac{p}{q}(k_1 T_1 + k_2 T_2)$, где k_1 и k_2 – взаимно простые целые числа, $k_1 T_1 + k_2 T_2 > 0$, а p и q – натуральные числа. Введем в рассмотрение множество $B = \left\{ \frac{mT_1 + nT_2}{q} \mid m, n \in \mathbf{Z} \right\}$.

Положим, что во всех точках множества \overline{B} функции f и g равны нулю, а на множестве B зададим эти функции следующим образом:

$$f\left(\frac{mT_1 + nT_2}{q}\right) = \frac{\left[\frac{n}{p}\right]}{k_2} + \sqrt{2} \left\{ \frac{n}{p} \right\} + \left\{ \frac{n}{q} \right\} + \left\{ \frac{m}{q} \right\};$$

$$g\left(\frac{mT_1 + nT_2}{q}\right) = -\frac{\left[\frac{m}{p}\right]}{k_1} + \sqrt{2} \left\{ \frac{m}{p} \right\} - \left\{ \frac{n}{q} \right\} - \left\{ \frac{m}{q} \right\}.$$

Здесь, как обычно, $[x]$ и $\{x\}$ обозначают соответственно целую и дробную часть числа x .

Функция $h = f + g$ на множестве \overline{B} равна нулю, а в точках множества B равна

$$h\left(\frac{mT_1 + nT_2}{q}\right) = \frac{\left[\frac{n}{p}\right]}{k_2} - \frac{\left[\frac{m}{p}\right]}{k_1} + \sqrt{2} \left(\left\{ \frac{m}{p} \right\} + \left\{ \frac{n}{p} \right\} \right).$$

Непосредственной подстановкой несложно проверить, что число T_1 – период функции f , число T_2 – период g , а T – период h . Покажем, что эти периоды – основные.

Любой период функции f принадлежит множеству B . Действительно, если $0 \neq x \in B$, $y \in \overline{B}$, то $f(x) \neq 0$, $f(x+y) = 0 \neq f(x)$. Значит, $y \in \overline{B}$ – не период функции f .

Итак, всякий период функции f имеет вид $T_f = \frac{s_1 T_1 + s_2 T_2}{q}$, где s_1 и s_2 – целые числа. Пусть

$x = \frac{m}{q} T_1 + \frac{n}{q} T_2$, $x \in B$. Если $n = 0$, то $f(x)$ – рациональное число. Теперь из рациональности числа

$f(x + T_f)$ вытекает равенство $\left\{ \frac{s_2}{p} \right\} = 0$. Значит, имеем равенство $s_2 = \lambda p$, где λ – некоторое целое число. Соотношение $f(x + T_f) = f(x)$ принимает вид

$$\frac{\lambda}{k_2} + \left\{ \frac{n + \lambda p}{q} \right\} + \left\{ \frac{m + s_1}{q} \right\} = \left\{ \frac{n}{q} \right\} + \left\{ \frac{m}{q} \right\}. \quad (1)$$

Данное равенство должно выполняться при всех целых m и n . При $m = n = 0$ правая часть (1) равна нулю. Поскольку дробные части неотрицательны, получаем отсюда, что $\frac{\lambda}{k_2} \leq 0$, а при $m = n = q - 1$ сумма дробных частей в правой части равенства (1) не меньше суммы дробных частей слева. Значит, $\frac{\lambda}{k_2} \geq 0$. Таким образом, $\lambda = 0$ и $s_2 = 0$. Поэтому период функции f имеет вид

$T_f = \frac{s_1 T_1}{q}$, а равенство (1) переходит в

$$\left\{ \frac{n}{q} \right\} + \left\{ \frac{m + s_1}{q} \right\} = \left\{ \frac{n}{q} \right\} + \left\{ \frac{m}{q} \right\}. \quad (2)$$

При $m = n = 0$ получаем $\left\{ \frac{s_1}{q} \right\} = 0$, т.е. s_1 делится на q , а любой период функции f кратен T_1 . Доказано, что T_1 – основной период функции f .

Аналогичные рассуждения применимы и к функции g .

Перейдем теперь к функции h . Так же, как и выше, устанавливаем, что период функции h должен быть вида $T_h = \frac{s_1 T_1 + s_2 T_2}{q}$, где s_1 и s_2 – целые числа. Из соотношений

$$h(0) = h(T_h) = \frac{\left[\frac{s_2}{p} \right]}{k_2} - \frac{\left[\frac{s_1}{p} \right]}{k_1} + \sqrt{2} \left(\left\{ \frac{s_1}{p} \right\} + \left\{ \frac{s_2}{p} \right\} \right) \quad (3)$$

получаем, что числа s_1 и s_2 должны быть кратны p , т.е. при некоторых целых λ_1 и λ_2 имеем $s_1 = \lambda_1 p$, $s_2 = \lambda_2 p$. Тогда соотношение (3) можно переписать в виде

$$\frac{\lambda_2}{k_2} - \frac{\lambda_1}{k_1} = 0.$$

Из равенства $\lambda_2 k_1 = k_2 \lambda_1$ и взаимной простоты чисел k_1 и k_2 , вытекает, что λ_2 делится на k_2 . Отсюда для некоторого целого числа t справедливы равенства $\lambda_2 = k_2 t$ и $\lambda_1 = k_1 t$, т.е. $T_h = \frac{pt}{q}(k_1 T_1 + k_2 T_2)$.

Показано, что любой период функции h кратен периоду $T = \frac{p}{q}(k_1 T_1 + k_2 T_2)$, который, таким образом, является основным. \square

Отсутствие основного периода

Теорема 6. Пусть T_1 и T_2 – произвольные положительные числа. Тогда существуют такие периодические функции f и g , что их основные периоды равны соответственно T_1 и T_2 , а их сумма $h=f+g$ периодична, но не имеет основного периода.

Доказательство. Рассмотрим два возможных случая.

I. Периоды T_1 и T_2 несизмеримы.

Пусть $A = \{mT_1 + nT_2 + kT \mid m, n \in \mathbb{Z}, k \in \mathbb{Q}\}$. Как и выше, легко показать, что если число представимо в виде $mT_1 + nT_2 + kT$, то такое представление единственное.

Положим, что во всех точках множества \bar{A} функции f и g равны нулю, а на множестве A зададим эти функции следующим образом:

$$f(mT_1 + nT_2 + kT) = nT_2 + kT, \quad g(mT_1 + nT_2 + kT) = mT_1 - kT.$$

Несложно убедиться в том, что число T_1 – основной период функции f , число T_2 – основной период g , и при любом рациональном k число kT – период функции $h = f + g$, у которой, таким образом, нет наименьшего периода.

II. Периоды T_1 и T_2 сизмеримы.

Пусть $T_1 = mT_0, T_2 = nT_0$, где $T_0 > 0$, m и n – натуральные числа. Введем в рассмотрение множество $B = \{(l + \sqrt{2}k)T_0 \mid l \in \mathbb{Z}, k \in \mathbb{Q}\}$.

Положим, что во всех точках множества \bar{B} функции f и g равны нулю, а на множестве B зададим эти функции так:

$$f((l + \sqrt{2}k)T_0) = \left\{ \frac{l}{m} \right\} + \sqrt{2}k, \quad g((l + \sqrt{2}k)T_0) = \left\{ \frac{l}{n} \right\} - \sqrt{2}k.$$

Функция $h = f + g$ на множестве \bar{B} равна нулю, а в точках множества B равна

$$h((l + \sqrt{2}k)T_0) = \left\{ \frac{l}{m} \right\} + \left\{ \frac{l}{n} \right\}.$$

Нетрудно проверить, что число $T_1 = mT_0$ – основной период функции f , число $T_2 = nT_0$ – основной период g , в то время как среди периодов функции $h = f + g$ есть все числа вида $\sqrt{2}kT_0$, где k – произвольное рациональное число. \square

В основе конструкций, доказывающих теорему 6, лежит несоизмеримость периодов функции $h = f + g$ с периодами функций f и g . Приведем в заключение пример таких функций f и g , что все периоды функций f , g и $f + g$ соизмеримы между собой, но у f и g есть основные периоды, а у $f + g$ – нет.

Пусть m – некоторое фиксированное натуральное число, M – множество несократимых нецелых дробей, числители которых кратны m . Положим

$$f(x) = \begin{cases} 1, & \text{если } x \in M; \\ \frac{1}{2}, & \text{если } x \in m\mathbb{Z}; \\ -\frac{1}{2}, & \text{если } x \in \mathbb{Z} \setminus m\mathbb{Z}; \\ 0 & \text{в остальных случаях;} \end{cases}$$

$$g(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}, & \text{если } x \in \mathbb{Z}; \\ 0, & \text{если } x \notin \mathbb{Z}. \end{cases}$$

Тогда $h(x) = \begin{cases} 1, & \text{если } x \in M \cup m\mathbb{Z}; \\ 0 & \text{в противном случае.} \end{cases}$

Легко видеть, что основные периоды функций f и g равны соответственно m и 1, в то время как сумма $f + g$ имеет периодом любое число вида m/n , где n – произвольное натуральное число, взаимно простое с m .

Литература

1. Математический энциклопедический словарь/ Гл. ред. Ю.В. Прохоров – М.: Сов. энциклопедия, 1988.
2. Микаэлян Л.В., Седракян Н.М. О периодичности суммы периодических функций// Математическое образование. – 2000. – № 2(13). – С. 29–33.
3. Геренштейн А.В., Эвнин А.Ю. О сумме периодических функций// Математика в школе. – 2002. – № 1. – С. 68–72.
4. Ивлев Б.М. и др. Сборник задач по алгебре и началам анализа для 9 и 10 кл. – М.: Просвещение, 1978.

Поступила в редакцию 18 августа 2004 г.

ИЗМЕРЕНИЕ ПЕРЕМЕННОЙ МАССЫ ТВЕРДОГО ТЕЛА В НЕДОСТУПНОМ ОБЪЕМЕ

С.Н. Абдрахиков, В.Л. Мурzin, К.В. Постаутов, О.К. Слива, П.А. Тараненко

Предложен способ определения переменной массы твердого тела в недоступном объеме. Изложен принцип работы измерительного комплекса и его составляющих. Приведены результаты экспериментального определения массы двух кристаллов кварца в процессе их выращивания в автоклаве.

Проблема экспериментального определения переменной массы твердого тела в недоступном объеме вытекает из необходимости контроля и управления технологическим процессом выращивания искусственных кристаллов. Например, кристаллы кварца выращиваются в автоклаве при

температуре порядка 340 °C и давлении 60 МПа. Автоклав представляет собой герметичный стальной сосуд со стенками толщиной около 250 мм, доступ в который в течение всего технологического цикла (80–300 суток) исключен, поэтому достаточно точное экспериментальное определение массы растущих кристаллов представляет собой нелегкую задачу. До настоящего времени и момент переключения режима работы автоклава с травления затравок на рост кристаллов, и регулирование скорости их роста, и момент остановки автоклава определяются расчетным путем, что не исключает ошибок в технологическом процессе и затрудняет его оптимизацию.

Схема измерительного комплекса, разработанного на кафедре «Прикладная механика, динамика и прочность машин» Южно-Уральского государственного университета совместно с заводом «Кристалл» (г. Южноуральск Челябинской обл.) [1], представлена на рис. 1.

Его основными частями являются:

1) рычажно-маятниковый динамометр 2, 7, 9, 10, 11, преобразующий изменение веса кристаллов-«свидетелей» 8 в вертикальное поступательное перемещение траверсы 7;

2) неподвижная система постоянных магнитов 12, жестко связанная с корпусом автоклава и образующая реперную точку, относительно которой определяется положение подвижной системы магнитов 6, жестко связанной с подвижной частью динамометра – траверсой 7;

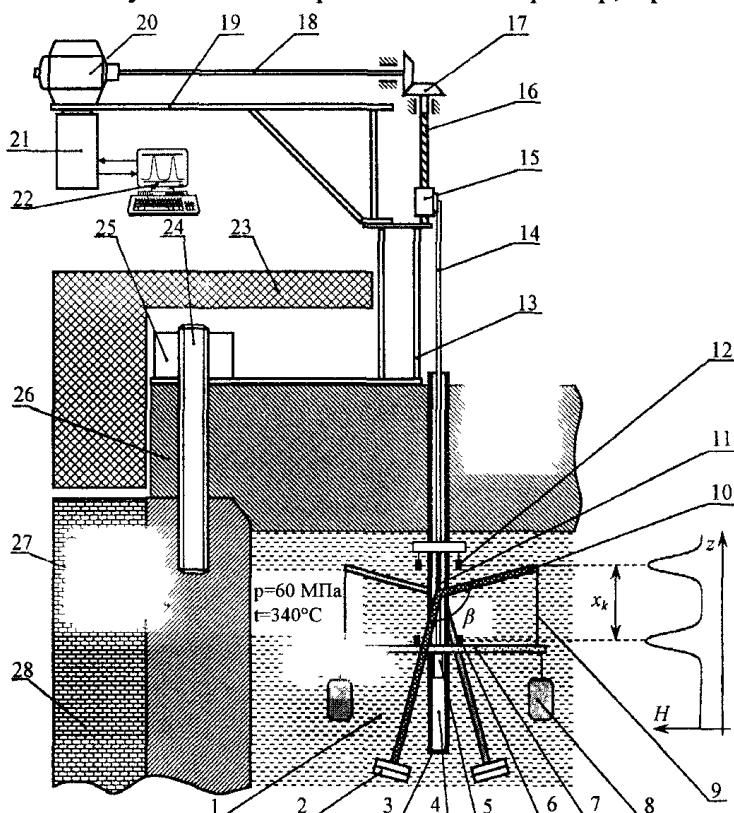


Рис. 1 Схема измерительного комплекса, установленного на автоклаве: 1 – герметичная полость автоклава; 2 – маятники; 3 – герметичный стакан; 4 – измерительная полость; 5 – датчик напряженности магнитного поля; 6 – подвижная система магнитов; 7 – траверса динамометра; 8 – кристалл-«свидетель»; 9, 11 – гибкие элементы; 10 – рычаг динамометра; 12 – неподвижная система магнитов; 13 – основание кронштейна; 14 – соединительная штанга; 15 – каретка с гайкой; 16 – винт; 17 – конический редуктор; 18 – вал; 19 – кронштейн; 20 – электродвигатель; 21 – электронный блок; 22 – ПЭВМ; 23 – кожух автоклава; 24 – шпилька; 25 – гайка; 26 – крышка автоклава; 27 – корпус автоклава; 28 – теплоизоляция

сом автоклава и образующая реперную точку, относительно которой определяется положение подвижной системы магнитов 6, жестко связанной с подвижной частью динамометра – траверсой 7;

3) датчик 5 напряженности магнитного поля, перемещаемый с помощью привода 14, 15, 16, 17, 18, 20 в полости 4 герметичного стакана 3, изготовленного из немагнитной высокомарганцевистой стали;

4) система управления, обработки и хранения информации – 21, 22.

Измерительный комплекс работает следующим образом. В ждущем режиме датчик 5 напряженности магнитного поля находится в крайнем верхнем положении – несколько выше неподвижной системы магнитов 12. По заданной программе ПЭВМ 22 включает привод, осуществляющий сначала холостой ход – перемещение датчика 5 в крайнее нижнее положение – несколько ниже подвижной системы магнитов 6 – и сразу же рабочий ход – перемещение датчика 5 в крайнее верхнее положение. При таком рабочем ходе против сил веса обеспечивается выбор возможных люфтов в системе привода. Во время рабочего хода ПЭВМ 22 одновременно записывает перемещение z , датчика 5, отсчитываемое от крайнего нижнего положения, и соответствующую ему величину напряженности H_{ki}^3 магнитного поля. Один из результатов таких измерений в автоклаве при давлении $p = 60$ МПа и температуре $t = 340^\circ\text{C}$ представлен точками на рис. 2.

Рисунок 2 показывает зависимость напряженности магнитного поля H от координаты z (мм). На графике изображены экспериментальные точки H_{ki}^3 (точки), аппроксимация экспериментальных точек $H_k^3(z)$ (сплошная линия) и аппроксимация при большем весе кристаллов – «свидетелей» $H_{k+1}^3(z)$ (пунктирная линия). График разделен на пять зон: I (0-40 мм), II (40-120 мм), III (120-160 мм), IV (160-200 мм), V (200-240 мм). В зоне III отмечена точка $S \rightarrow \min$, соответствующая минимальному значению напряженности. На оси z отмечены значения 0, 40, 80, 120, 160, 200, 240 мм. На оси H отмечены значения 0, 20, 40, 60, 80, 100, 120.

Рис. 2. Результаты измерений и их аппроксимация

С увеличением массы кристаллов-«свидетелей» 8 траверса 7, на которой они подвешены, опускается вместе с подвижной системой магнитов 6. При этом изменяется взаимное положение x магнитных полей неподвижной и подвижной магнитных систем, отслеживаемое датчиком напряженности магнитного поля. Математическая обработка экспериментальных точек H_{ki}^3 позволяет определить перемещение подвижной части динамометра, а по нему – массу m кристаллов-«свидетелей».

Рассмотрим особенности важнейших элементов измерительного комплекса.

Динамометр. Опыт показал, что в агрессивной среде при температуре 340°C любые пружины со временем теряют свои свойства, что исключает возможность их использования в измерительной системе в качестве упругих элементов. Нежелательно также использование шарнирных соединений вследствие подверженности их закварцовыванию. Поэтому в примененной конструкции динамометра в качестве восстанавливающей силы используется только сила веса маятников 2, а взаимный поворот жестких деталей обеспечивается изгибом многожильных тонких проводов или длинных лент.

В принятой схеме динамометра нагружение траверсы силами веса кристаллов-«свидетелей» приводит к ее вертикальному поступательному перемещению, параллельному оси измерительного стакана 3. Это обеспечивает неизменность формы магнитного поля подвижной системы магнитов 6 (рис. 2), измеряемого датчиком 5.

Неизменность же формы магнитного поля является необходимым условием высокой точности измерения положений траверсы, а следовательно, массы m кристаллов – «свидетелей».

Ползучесть упругих элементов 9, 11, работающих на растяжение при низких напряжениях, оказывается пренебрежимо малой. Поперечные размеры этих элементов выбраны так, что их изгибная жесткость оказывает малое влияние на восстанавливающий момент маятниковой системы, так что их ползучестью при изгибе также можно пренебречь. По заданным весогабаритным параметрам динамометра получено аналитическое выражение его характеристики жесткости. Более надежный результат, однако, даёт тарировочная кривая, приведенная на рис. 3. Координата u на тарировочном графике отсчитывается от точки, соответствующей горизонтальному положе-

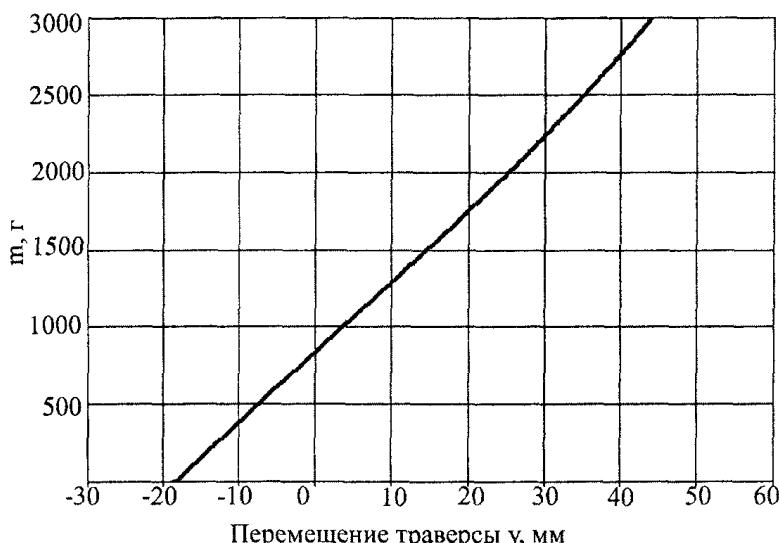


Рис. 3. Тарировочная кривая динамометра $y(m)$

положенных вблизи измерительного стакана и создающих в нем магнитное поле. В качестве магнитов используются цилиндрические элементы диаметром $d=4$ мм и высотой $h=3$ мм из сплава КС25Ду. Для увеличения напряженности магнитного поля в пространстве между магнитами используется кольцевой магнитопровод из ферромагнитной стали (рис. 5).

Введенная в устройство неподвижная система постоянных магнитов, закрепленная в корпусе камеры вблизи герметичного измерительного стакана, играет роль реперной точки, относительно которой определяется положение подвижной системы магнитов, жестко связанной с изменяющейся массой кристаллов-«свидетелей». Введение такой точки отсчета устраняет влияние на точность определения положения подвижной системы магнитов таких факторов, как изменение длины штанги 14 вследствие ее температурных деформаций, ее возможная замена, замена датчика напряженности магнитного поля.

Действительно, разность $x = z^H - z^P$ дает текущее расстояние между магнитными системами при проведенном k -м измерении. Температурная деформация или замена соединительной штанги 14 смещают на оси z координату z^H реперной точки и координату z^P подвижной магнитной системы на одну и ту же величину, не влияя на разность x , по которой вычисляется приращение массы кристаллов-«свидетелей».

Датчик напряженности магнитного поля. Принцип его работы основан на изменении магнитной проницаемости ферромагнитного сердечника, находящегося в катушке индуктивности, помещаемой в магнитное поле. Изменение магнитной проницаемости сердечника приводит к изменению индуктивности катушки и, следовательно, частоты колебаний электрического контура, в который она включена. Современные технические средства позволяют с высокой точностью измерять частоту электрических колебаний, что обеспечивает регистрацию довольно малых изменений напряженности магнитного поля.

Конструктивно датчик (рис. 4) представляет собой катушку из медного провода диаметром 0.1-0.15 мм в высокотемпературной изоляции (ПМС, ПЭСК, ПНЭТ, ПЭТВ, ПЭЖБ), намотанного на керамическую трубку диаметром 3-5 мм и длиной 10-12 мм.

Внутри катушки помещается сердечник из пермаллоя с высокой магнитной проницаемостью, например, марки 34НКМП. Сечение сердечника составляет, примерно, $0,04 \text{ mm}^2$. К обмотке катушки привариваются выводы из ла-

нию рычага 10 динамометра. Подбор массы противовесов и угла β (см. рис. 1) между плечами двуплечего рычага позволил при заданных конструктивных ограничениях получить малую нелинейность характеристики $y(m)$ и, соответственно, равномерную чувствительность динамометра во всем диапазоне измерения.

Магнитные системы. В измерительном комплексе используются две магнитные системы – подвижная, закрепленная на траверсе динамометра, и неподвижная, жестко соединенная с корпусом камеры. Каждая из магнитных систем содержит две группы постоянных магнитов, рас-

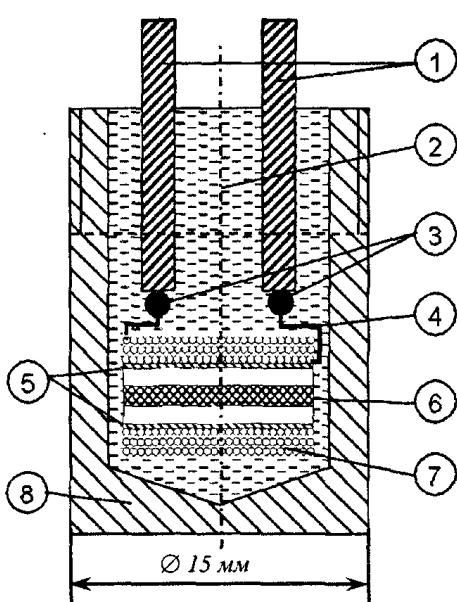


Рис. 4. Датчик напряженности магнитного поля: 1 – латунные выводы; 2 – термостойкий цемент; 3 – места сварки; 4 – обмоточный провод; 5 – керамическая катушка; 6 – сердечник из пермаллоя; 7 – межслойная изоляция; 8 – патрон из немагнитного металла

тунной проволоки диаметром 0,5–0,7 мм, а сама катушка помещается в стакан из латуни или нержавеющей стали и заливается термостойким цементом. Состав термостойкого цемента по весу: портландцемент – 1 часть, микрокремнезем – 0,1 части, обожженный шамот – 1–3 части, вода – до получения пасты желаемой консистенции (ориентированно 0,3–0,4 части от веса порошковой массы). Для лучшего уплотнения влажной цементной массы патрон с датчиком устанавливался на вибростенд и подвергался воздействию вибрации при амплитуде виброускорения порядка 2g. При такой герметизации датчик без сбоев проработал весь цикл измерений (3 месяца).

Математическая обработка результатов измерения. Блок математической обработки предназначен для определения расстояния между подвижной 6 и неподвижной 12 магнитными системами по экспериментально полученной дискретной зависимости параметра H_{ki}^3 , пропорционального напряженности H магнитного поля.

Будем аппроксимировать экспериментально полученное магнитное поле H_{ki}^3 суммой полей двух магнитных систем, расположенных при k -том измерении в точках z_{Pk}^T и z_{Hk}^T (рис. 2), которые до обработки неизвестны.

$$H_k^T(z, z_{Pk}^T, z_{Hk}^T) = M_1 \cdot T(z, z_{Pk}^T) + M_2 \cdot T(z, z_{Hk}^T), \quad (1)$$

где M_1 и M_2 – намагниченности постоянных магнитов, T – форма магнитного поля (рис. 6) пары призматических магнитов [2],

$$T(z, z_c) = \begin{bmatrix} \arctg \frac{[z - (z_c - a)] \cdot L}{h1 \sqrt{[z - (z_c - a)]^2 + L^2 + h1^2}} - \arctg \frac{[z - (z_c - a)] \cdot L}{h1 \sqrt{[z - (z_c - a)]^2 + L^2 + h1^2}} \\ - \arctg \frac{[z - (z_c + a)] \cdot L}{h2 \sqrt{[z - (z_c + a)]^2 + L^2 + h2^2}} + \arctg \frac{[z - (z_c + a)] \cdot L}{h2 \sqrt{[z - (z_c + a)]^2 + L^2 + h2^2}} \end{bmatrix}, \quad (2)$$

где a , L , $h1$, $h2$ – параметры магнитной системы, представленной на рис. 6, z_c – координата точки расположения магнитной системы на оси z .

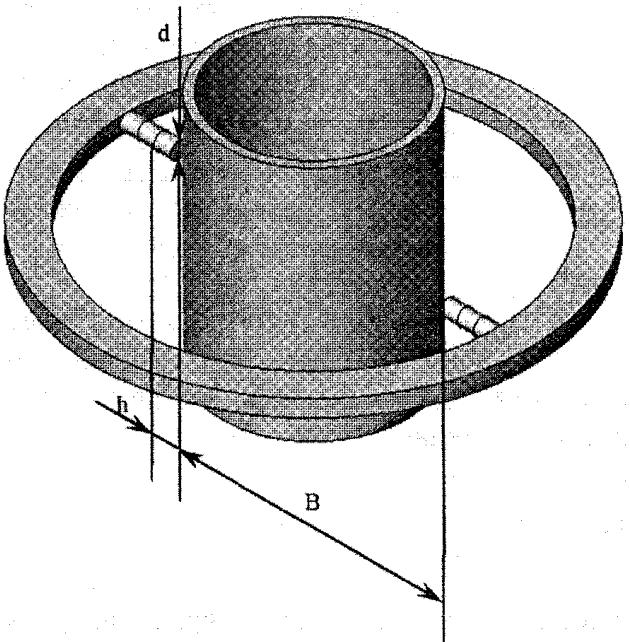


Рис. 5. Магнитная система с магнитопроводом

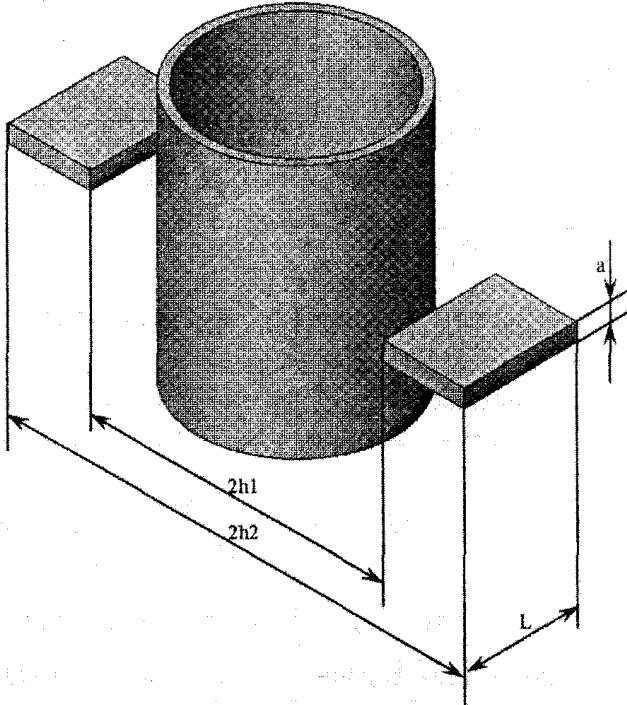


Рис. 6. Расчетная схема аппроксимирующей магнитной системы

Очевидно, что реальная и аппроксимирующая магнитные системы заметно отличаются. Однако подбором параметров a , L , $h1$, $h2$ удается, как это видно из рис. 2, добиться хорошего совпадения формы магнитных полей на оси измерительного стакана.

В общем случае экспериментальные значения максимумов $H_{Pk\max}^3$ и $H_{Hk\max}^3$ не совпадают и

их соотношение влияет, хотя и слабо, на положение вершин z_{Pk}^T и z_{Hk}^T . Будем считать, что это несовпадение обусловлено разной намагниченностью постоянных магнитов, то есть величинами M_1 и M_2 в (1). Тогда первым шагом в аппроксимации экспериментальной кривой H_k^3 аналитической зависимостью (1) является приближенное определение множителей M_1 и M_2 , которые можно найти из решения системы двух линейных уравнений

$$\begin{cases} M_1 \cdot T(z_{Pk}^T, z_{Pk}^T) + M_2 \cdot T(z_{Pk}^T, z_{Hk}^T) = H_k^T(z_{Pk}^T, z_{Pk}^T, z_{Hk}^T), \\ M_1 \cdot T(z_{Hk}^T, z_{Pk}^T) + M_2 \cdot T(z_{Hk}^T, z_{Hk}^T) = H_k^T(z_{Hk}^T, z_{Pk}^T, z_{Hk}^T). \end{cases} \quad (3)$$

Достаточно густое расположение экспериментальных точек позволяет взять в качестве $H_k^T(z_{Pk}^T, z_{Pk}^T, z_{Hk}^T)$ и $H_k^T(z_{Hk}^T, z_{Pk}^T, z_{Hk}^T)$ максимальные экспериментальные значения $H_{Pk\max}^3$ и $H_{Hk\max}^3$.

Истинные координаты z_{Pk}^T и z_{Hk}^T положения максимумов теоретической кривой (1) определяются из условия минимума функции

$$S(z_{Pk}^T, z_{Hk}^T) = \sum_{i=1}^N (H_{ki}^3 - H_k^T(z_i, z_{Pk}^T, z_{Hk}^T))^2 \rightarrow \min, \quad (4)$$

представляющей собой сумму квадратов отклонений экспериментальных точек H_{ki}^3 от аппроксимирующей их кривой (1) и равной заштрихованной площади (см. рис. 2).

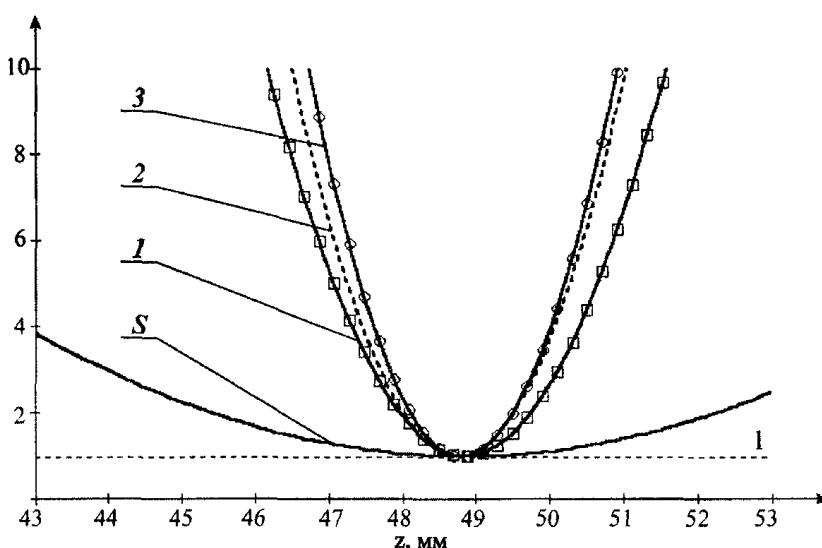


Рис. 7. Результат введения весовых функций

щед на участках I, III, V позволяет введение в правую часть (4) весовой функции, «вырезающей» эти участки. В качестве таковых использовались следующие функции:

$$G_1 = \left(\frac{dH^T(z, z_{Pk}^T, z_{Hk}^T)}{dz} \right)^2; \quad G_2 = [H^T(z, z_{Pk}^T, z_{Hk}^T)]^2; \quad G_3 = G_1 \cdot G_2.$$

Зависимости $S(z, z_{Hk}^T)$ при введении весовых функций G_j показаны на рис. 7 кривыми 1, 2 и 3 соответственно. В расчетах далее использовалась функция G_3 .

Значительное число N экспериментальных точек (в реализованной системе их 250) позволяет добиться высокой точности определения координат z_{Pk}^T и z_{Hk}^T осей подвижной и неподвижной магнитных систем.

Результаты испытаний измерительного комплекса. Испытание измерительного комплекса проводилось на автоклаве №144 с 08.11.2001 г. по 18.01.2002 года. К траверсе динамометра было подвешено 2 затравки кристаллов-«свидетелей» массой 60 грамм каждая. Кривые изменения массы двух кристаллов во времени представлены на рис. 8 и рис. 10.

Зависимость суммы квадратов $S(z_{Pk}^T, z_{Hk}^T)$ от искомой координаты положения z_{Pk}^T подвижной магнитной системы при $z_{Hk}^T = \text{const}$ в одном из приближений показана на рис. 7 (кривая S). Медленное изменение функции S в окрестности минимума обусловлено значительным вкладом в S не зависящих от z_{Pk}^T различий экспериментальных и теоретических значений напряженностей магнитных полей на участках I, III, V (см. рис. 2).

Уменьшить маскирующее влияние постоянной составляю-

Запись началась при температуре в автоклаве, равной 282°C и велась в начальный период с интервалом в 6–10 минут. В течение примерно шести часов прибор показывает быстрое изменение массы кристаллов – участок ABC кривой на рис. 8. Однако в действительности оно обусловлено затоплением динамометра в процессе подъема уровня нагревающегося содового раствора.

В этом эксперименте использовалась одна из первых конструкций динамометра (рис. 9). В такой конструкции вначале при затоплении маятников m_{M2} и самих кристаллов происходит их

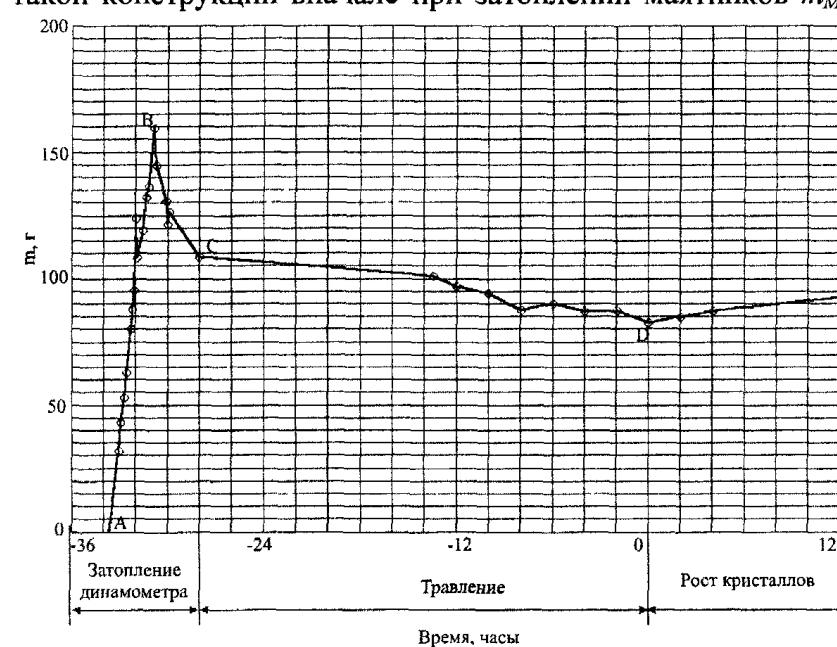


Рис. 8. Результаты измерений в течение первых двух суток

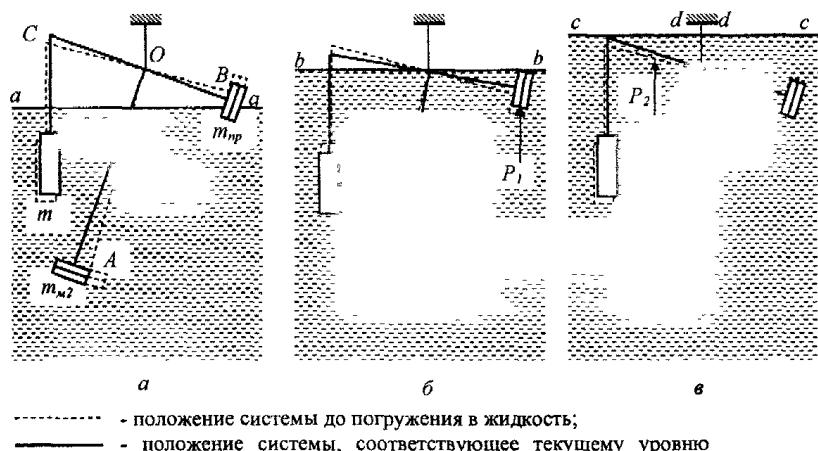


Рис. 9. Затопление динамометра

Точка C соответствует полное затопление динамометра, дальнейшее уменьшение массы кристаллов обусловлено их растворением (травлением поверхностей затравок).

Точка D соответствует переключению температурного поля автоклава на режим роста кристаллов, продолжающегося вплоть до точки E (см. рис. 10).

Анализ показал, что в первой половине периода роста, когда происходили довольно частые перерывы в замерах, наблюдались заметные различия результатов первого после выстоя замера и последующих, проведенных с минимальным шагом по времени (5 минут). Оказалось, что причиной этого является различная степень намагниченности пермаллоевого сердечника датчика при первом и последующих проходах. После длительного выстоя (десятки часов) в крайнем нижнем положении (вначале было принято именно такое расположение датчика в ждущем режиме) при температуре 340°C происходит полное размагничивание пермаллоевого сердечника. В таком состоянии датчик находится во время первого измерения после выстоя. Следующее измерение происходит уже при третьем проходе датчика через магнитные поля подвижной и неподвижной магнитных систем, когда пермаллоевый сердечник уже заметно намагнчен. Это и обуславливает разность показаний при двух сделанных подряд измерениях. Поэтому при дальнейших испытаниях

выталкивание из раствора, что приводит к кажущемуся изменению массы затравок (вплоть до отрицательных значений). Этот этап не был зафиксирован. Начало измерений совпало с этапом затопления противовесов m_{pp} .

Кажущееся увеличение массы кристаллов на участке AB (см. рис. 8) обусловлено подъемом жидкости в автоклаве от уровня $a-a$ до уровня $b-b$ (см. рис. 9), когда появляется выталкивающая сила P_1 , действующая на противовесы m_{pp} и опускающая кристаллы m . При дальнейшем подъеме уровня жидкости от $b-b$ до $c-c$ происходит затопление участка OC (см. рис. 9) рамки рычажно-маятниковой системы с появлением выталкивающей силы P_2 , поднимающей кристаллы. Объем материала рамки невелик, так что выталкивающая сила эквивалентна уменьшению массы всего лишь на 50 грамм. Расстояние между уровнями $a-a$ и $b-b$ составляет в динамометре при массе кристаллов 120 грамм порядка 80 мм. Это расстояние пройдено зеркалом жидкости примерно за 2 часа. То есть скорость подъема зеркала раствора составила, примерно, 40 мм/час.

ниях в ждущем режиме датчик находился в крайнем верхнем положении. В этом случае перед замером он подвергается предварительному намагничиванию, когда осуществляется его холостой ход. Эта мера позволила заметно уменьшить разброс показаний прибора (см. рис. 10, вторая половина технологического цикла).

Интересен последний этап цикла – участок *EFG* (см. рис. 10) – это конденсация раствора, когда после «всплытия» динамометра произошло «увеличение» веса кристаллов на 596 грамм. Оно обусловлено исчезновением архимедовой силы, приложенной к системе, содержащей элементы различной плотности.

Отметим, что если процесс затопления динамометра, связанный с расширением раствора и его последующей гомогенизацией, продолжался в течение нескольких часов, то конденсация раствора произошла в течение не более 30 минут. В 14:50 16.01.2002 зафиксирована масса в 2693 грамма, а при замере в 15:20 уже 3274 грамма, то есть конденсация раствора завершилась. Обнаружить образование поверхностей раздела фаз и ее перемещение не удалось.

Усредненная скорость роста кристаллов (см. рис. 10, кривая 2) получена аппроксимацией результатов измерения полиномом четвертой степени и его последующим дифференцированием.

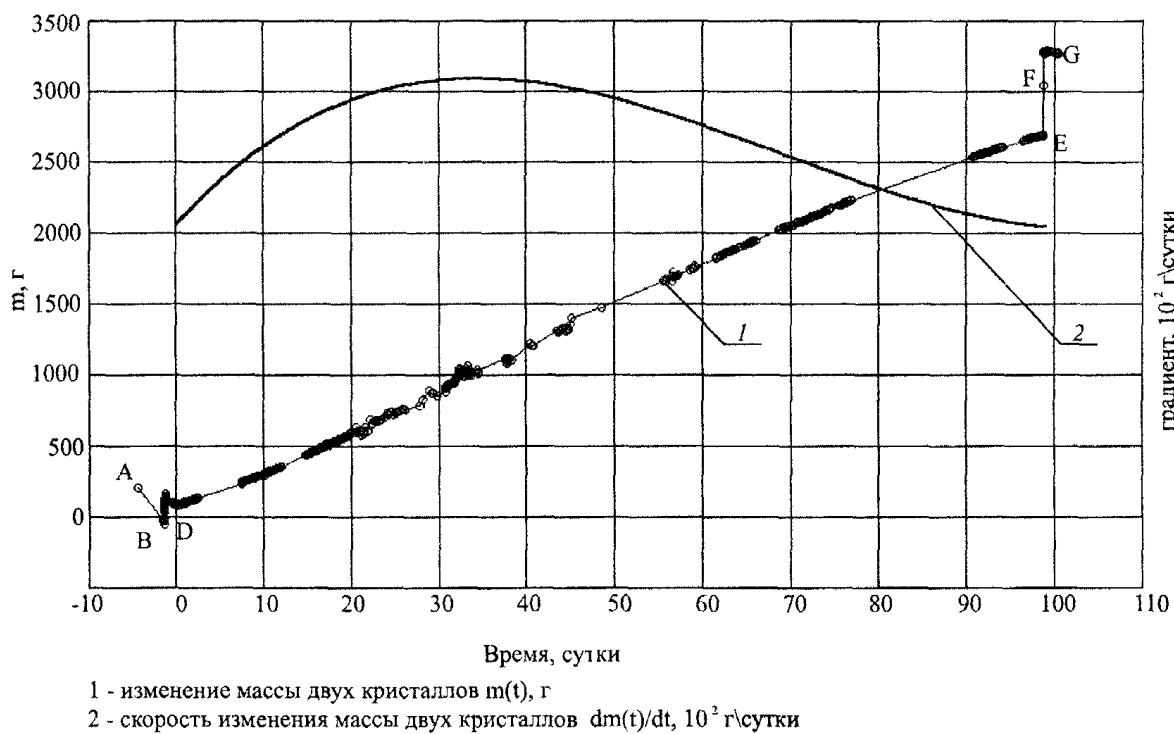


Рис. 10. Экспериментальная кривая изменения массы 2 кристаллов и усредненная скорость их роста

Заключение

Разработаны и созданы элементы измерительной системы и методика математической обработки результатов измерения, обеспечивающие возможность определения находящейся в недоступном объеме переменной массы твердого тела в диапазоне 0–3 кг с погрешностью не более 5 грамм. Работоспособность измерительного комплекса доказана его испытанием в натурных условиях.

Литература

- Свидетельство RU № 36141, G01G 7/00. Устройство для измерения переменной массы твердого тела в герметичном объеме.
- Саркисян Л.А. Аналитические методы расчета стационарных магнитных полей. Справочное пособие. – М.: Энергоатомиздат, 1993. – 288 с.

Поступила в редакцию 14 сентября 2004 г.

О ВЛИЯНИИ ПЕРВОГО ИНВАРИАНТА НАПРЯЖЕНИЙ НА МАЛОЦИКЛОВУЮ УСТАЛОСТЬ

А.А. Абызов, О.С. Садаков

Предложена модификация критерия В.Л. Колмогорова, отображающего влияние вида напряженного состояния на располагаемую пластичность. Модификация не изменяет результаты при простом нагружении, однако позволяет обобщить критерий на повторно-переменное нагружение.

При создании удобной в практическом применении математической модели сложного процесса мы вынуждены ограничиваться небольшим числом параметров состояния. Определяющую роль при этом играет выбор наиболее важных параметров. По сути, проблема сводится к отсеванию таких параметров, которыми в текущем (первом, втором...) приближении можно пренебречь. Например, при описании реологических свойств относительно простых сред (сталей) в относительно простых условиях (регулярное циклическое нагружение) весьма удачным было предложение пренебречь влиянием третьего (постулат изотропии А.А. Ильюшина) и первого инвариантов тензора напряжений. Эти меры, возможно, принятые временно, оказались очень живучи и вполне эффективны.

Естественно, при расширении круга рассматриваемых явлений допущения требуют пересмотра. Например, при изучении пластически сжимаемых сред совершенно необходимо включить в рассмотрение первый инвариант. То же относится и к описанию процессов разрушения металлических конструкционных материалов.

При простом (однократном пропорциональном) нагружении сопротивление разрушению характеризуется величиной располагаемой пластичности p_F . Это значение интенсивности пластической деформации $p_u = \sqrt{p_y p_{yy}}$ (p_y – компоненты тензора пластической деформации в декартовых координатах) в момент разрушения. Как показывают испытания, располагаемая пластичность существенно зависит от первого инварианта напряжения. В.Л. Колмогоров [1, 2] для описания этой зависимости предложил использовать безразмерный параметр, названный «жесткостью» нагружения:

$$\mu_0 \equiv \sigma_0 / \sigma_u \quad (1)$$

– отношение первого инварианта (точнее, среднего нормального напряжения $\sigma_0 = \sigma_{kk}/3$) к интенсивности напряжений σ_u . Последняя может вычисляться по формуле $\sigma_u = \sqrt{s_y s_{yy}}$, где s_y – компоненты девиатора напряжений. Параметр (1) удобен тем, что он не изменяется в процессе пропорционального нагружения. Очевидно, что для каждого материала существует своя характеристическая функция $p_F(\mu_0)$.

Удобно ввести относительную располагаемую пластичность [3]:

$$f(\mu_0) = p_F(\mu_0) / p_{Fp}, \quad (2)$$

где p_{Fp} – располагаемая пластичность при одноосном растяжении, когда $\mu_0 = \mu_p = 1/\sqrt{6}$; следовательно, $f(\mu_p) = 1$. При этом в прочностных расчетах используются стандартная величина p_{Fp} и функция влияния вида напряженного состояния

$$p_F = p_{Fp} f(\mu_0). \quad (3)$$

Результаты экспериментов укладываются на простую функцию [3]:

$$y = \exp(a - b\mu_0)). \quad (4)$$

Параметры a и b в выражении (4) – характеристики материала:

$$a = \ln(f(0)), \quad b = a / \mu_p = \sqrt{6}a, \quad (5)$$

где $p_F(0)$ – значение p_F при нулевой жесткости (например, при чистом сдвиге).

Переходя к непростому – непропорциональному, повторно-переменному – нагружению, приходится отказываться от выражений конечного вида (3) и использовать уравнения состояния инкрементального типа. Очевидно, что жесткость напряженного состояния и в этом случае оказывает влияние на прочность или усталость конструкции, однако возможность использования параметра (1) для описания этого влияния вызывает определенные сомнения.

В процессе неупругого деформирования постепенно накапливаются необратимые изменения в структуре материала; достижение их критической величины определяет момент возникновения усталостной трещины (естественно, что понятие «момент» условно, оно знаменует переход от малозаметных изменений состояния среды к заметным). В случае склерономных (и, возможно, реономных) процессов эти изменения происходят со скоростью, нелинейно связанной со скоростью неупругого деформирования; для их описания вводят параметр состояния среды – поврежденность ω , приращение которой $d\omega$ линейно связывают с приращением неупругой деформации:

$$d\omega = \varphi(\xi_k) d\lambda, \quad (6)$$

где ξ_k – некоторые параметры состояния, влияющие на повреждаемость, $d\lambda = \sqrt{dp_y dp_y}$ – приращение параметра Удквиста. При нагружении происходит накопление $d\omega$ от 0 до некоторой критической величины ω_{kp} , соответствующей разрушению материала, например, до p_F .

При непропорциональном и повторно-переменном нагружении, как известно, изменение пластической деформации определяется не текущим значением интенсивности напряжений, а всей предысторией. Наибольшее влияние на скорость пластической деформации оказывает интенсивность изменения напряжений (см., например, выражения для расширенного принципа Мазинга [4]). Но это не может относиться к первому инварианту: механизм его влияния на процесс повреждаемости (разрывления) связан именно с текущим значением инварианта, а не его изменением. Поэтому ни текущее значение параметра μ_0 , ни его изменение в процессе нагружения не вписываются в физическую картину повреждаемости при повторно-переменном нагружении.

В роли параметра, определяющего влияние вида напряженного состояния на усталость (и, как частный случай, на разрушение при простом нагружении) нам представляется корректным использовать сам инвариант σ_0 или его безразмерный аналог, например,

$$s_0 \equiv \sigma_0 / \sigma_{Fp}. \quad (7)$$

Здесь σ_{Fp} – константа материала – интенсивность напряжения в момент разрушения при растяжении. Преимуществом предлагаемого параметра по сравнению с «жесткостью» μ_0 (1) является также отсутствие неопределенности при $\sigma_u = 0$. В частном случае простого нагружения достаточно, по-видимому, ввести лишь один параметр состояния:

$$d\omega = \varphi(s_0) d\lambda. \quad (8)$$

Достаточно простая зависимость $\varphi(s_0)$ не может быть универсальной, однако в частном случае простого нагружения может оказаться эффективной. Выражение для функции $\varphi(s_0)$ можно получить, рассматривая случай пропорционального нагружения. В этом случае все компоненты тензора напряжений изменяются пропорционально одному параметру; при этом компоненты девиатора напряжений, как и среднее напряжение, возрастают пропорционально интенсивности σ_u ; коэффициент жесткости нагружения μ_0 не изменяется. В этом случае величина p_F может быть получена из выражений (2) и (4). Величина σ_u (в рамках постулата изотропии) однозначно связана с p_u . Если для описания кривой деформирования использовать формулу Рамберг-Огуда (хорошо отвечающую экспериментам [5]):

$$\sigma_u = K(p_u)^m, \quad (9)$$

(константы K , m – реологические характеристики материала), то при простом нагружении можно найти приращение $d\lambda$:

$$d\lambda = dp_u = \frac{p_u}{m\sigma_u} d\sigma_u \quad (10)$$

и напряжение разрушения:

$$\sigma_F = K(p_F)^m = K f(\mu_0)^m p_F^m = (f(\mu_0))^m \sigma_{Fp}. \quad (11)$$

Интегрируя выражение (8), получим:

$$\int_0^{\omega_{kp}} d\omega = \int_0^{x_k} \varphi(\mu_0 x) \frac{P_{Fp}}{m} x^\beta dx = p_{Fp}, \quad (12)$$

где $x_k = \exp(m(a - b\mu_0))$ – конечное значение величины x , соответствующее разрушению.

Выражение (12) можно использовать для нахождения функции $\varphi(s_0) \equiv \varphi(\mu_0 x)$. Поскольку вид этой функции неизвестен, целесообразно искать ее в виде обобщенного полинома:

$$\varphi(s_0) = \sum_{j=0}^N d_j \xi_j(s_0), \quad (13)$$

где $\xi_j(s_0)$ – линейно-независимые базисные функции. Неизвестные коэффициенты d_j в этом случае могут быть найдены из следующей системы линейных уравнений:

$$\sum_{j=0}^N d_j \int_0^{(x_k)_i} \xi_j(\mu_0 x) x^\beta dx = m, \quad i = 0 \dots M, \quad (14)$$

где $(x_k)_i = \exp(m(a - b\mu_{0i}))$. Эту систему уравнений можно записать в матричной форме:

$$[C]\bar{d} = \bar{e}, \quad (15)$$

где \bar{d} – столбец неизвестных коэффициентов d_j , $e_i = m$. Поскольку мы ищем приближенное выражение для функции $\varphi(s_0)$, целесообразно использовать метод наименьших квадратов, т.е. задать число уравнений ($M+1$) больше числа неизвестных ($N+1$). В этом случае неизвестные коэффициенты могут быть найдены следующим образом:

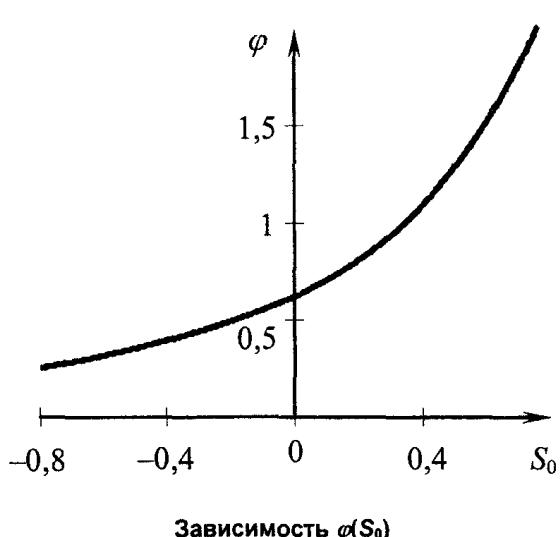
$$\bar{d} = ([c]^T [c])^{-1} ([c]^T \bar{e}). \quad (16)$$

В качестве примера рассмотрим построение функции $\varphi(s_0)$ при использовании степенного базиса:

$$\varphi(s_0) = \sum_{j=0}^N d_j s_0^j. \quad (17)$$

Выражения для элементов матрицы $[C]$ в этом случае имеют следующий вид:

$$C_{ij} = \int_0^{(x_k)_i} (\mu_0 x)^j x^\beta dx = \mu_0^j \exp(m(\beta + j + 1)(a - b\mu_0)) / (\beta + j + 1). \quad (18)$$



Для примера на рисунке показана кривая $\varphi(s_0)$, полученная при $K = 600$ МПа, $a = 0,4$. Расчетные исследования показали, что в актуальном диапазоне s_0 эта функция практически не изменяется при увеличении степени интерполирующего многочлена выше 4; при этом для нахождения его коэффициентов достаточно пяти уравнений. Хорошо видно, что полученная зависимость $\varphi(s_0)$ близка к экспоненте.

Таким образом, для отражения влияния среднего напряжения при однократном нагружении может использоваться параметр μ_0 , предложенный В.Л. Колмогоровым. Однако при непропорциональном и (или) повторно-переменном нагружении от этого параметра приходится отказываться. Предлагаемый вместо него параметр s_0 можно использовать для этой цели и при простом, и при сложном нагружении. Функция $f(\mu_0)$, найденная при простом нагружении, достаточно легко преобразуется в зависимость $\varphi(s_0)$ по предложенной схеме.

гаемый вместо него параметр s_0 можно использовать для этой цели и при простом, и при сложном нагружении. Функция $f(\mu_0)$, найденная при простом нагружении, достаточно легко преобразуется в зависимость $\varphi(s_0)$ по предложенной схеме.

Литература

1. Колмогоров В.Л. Напряжения. Деформация. Разрушение. – М.: Металлургия, 1970. – 264 с.
2. Пластичность и разрушение/ В.Л. Колмогоров, А.А. Богатов, Б.Д. Мигачев и др.. – М.: Металлургия, 1977. – 313 с.
3. Кононов К.М., Порошин В.Б. Описание малоциклического разрушения конструкционных сплавов при повышенной температуре с учетом среднего напряжения // Прочность машин и аппаратов при переменных нагрузлениях: Тематич. сб. научн. тр. – Челябинск: ЧПИ, 1986. – С.39–42.
4. Гохфельд Д.А., Садаков О.С. Пластичность и ползучесть при переменных нагрузлениях. – М.: Машиностроение, 1984. – 325 с.
5. Механические свойства сталей и сплавов при нестационарном нагружении: Справочник / Д.А. Гохфельд, Л.Б. Гецов, К.М. Кононов и др. – Екатеринбург: УрО РАН, 1996. – 408 с.

Поступила в редакцию 15 февраля 2005 г.

ПРИМЕНЕНИЕ СТРУКТУРНОЙ МОДЕЛИ ДЛЯ ОЦЕНКИ УСТАЛОСТИ ПРИ МНОГОПАРАМЕТРИЧЕСКОМ СЛУЧАЙНОМ ВОЗДЕЙСТВИИ

А.А. Абызов, О.С. Садаков

В статье предложена методика расчетной оценки усталостной долговечности конструкций при многопараметрическом многоцикловом нагружении, основанная на использовании структурной модели материала. История деформаций находится из линейно упругого расчета. Поврежденность материала связывается с микропластическими деформациями. Приведены основные соотношения метода и результаты тестовых расчетов.

1. В связи с развитием вычислительной техники все более широкое применение находят методы расчетной оценки усталостной долговечности ответственных деталей на ранних стадиях проектирования. Применительно к транспортным гусеничным машинам такая методика предложена в работах [1, 2]. Она предполагает компьютерное моделирование динамических процессов, происходящих при движении машины в условиях многопараметрического случайного воздействия внешней среды. Путем численного интегрирования уравнений движения получают процессы изменения обобщенных координат и, затем, сил, действующих на детали шасси. В дальнейшем с помощью моделей накопления повреждений может быть получена оценка ресурса рассматриваемой детали. В случае многоциклического нагружения расчет напряженно-деформированного состояния не представляет трудностей, так как можно использовать законы линейной упругости. Однако модель накопления усталостных повреждений еще недостаточно разработана.

Наибольшие трудности представляет оценка усталостной долговечности деталей, работающих в условиях многопараметрического случайного нагружения, когда компоненты тензора напряжений в опасной точке являются независимыми случайными процессами. Примерами таких деталей являются рамы и несущие корпуса транспортных машин, а также элементы двигателя. В работе [3] рассмотрена одна из таких деталей – балансир гусеничной машины, соединяющий опорный каток с корпусом. Нагрузку, действующую на каждый опорный каток машины при движении по трассе, можно разложить на три составляющие: вертикальную, продольную, обусловленную силами сопротивления, и боковую, возникающую при поворотах. Процессы изменения этих нагрузок во времени являются слабокоррелированными случайными процессами. Угол поворота балансира относительно корпуса также изменяется по случайному закону. В связи с этим опасная точка на поверхности стебля балансира находится в условиях плоского напряженного состояния, когда процессы изменения компонент тензора напряжений $\sigma_x(t)$, $\sigma_y(t)$, $\tau_{xy}(t)$ являются независимыми случайными процессами.

Как показывает анализ литературы [4, 5], в настоящее время для такого случая нагружения отсутствует общепринятая методика расчетной оценки долговечности. Обычно ограничиваются случаем, когда компоненты тензора напряжений изменяются синхронно и синфазно по периодическому закону. Для этого случая рекомендуется рассчитывать амплитуду эквивалентного напряжения по амплитудам компонентов тензора напряжений, используя общепринятые гипотезы (например, максимальных касательных напряжений или октаэдрических напряжений) и в дальнейшем вести расчет методами, предназначенными для одноосного нагружения. Экстраполируя такой подход на процесс регулярного симметричного пропорционального нагружения, заметим, что он означает замену истинной амплитуды на вдвое меньшую (с увеличением числа циклов вдвое), что ведет к очевидным ошибкам.

2. Методика расчета для случая, когда в каждом цикле нагружения компоненты тензора напряжений изменяются синхронно и синфазно (главные площадки остаются неподвижны) разработана на кафедре ПМиДПМ ЮУрГУ [6–8]. В соответствии с этим подходом в окрестности опасной точки рассматривается совокупность площадок, в каждой из которых ведется расчет накопленного повреждения. В каждом цикле нагружения для каждой площадки вычисляется амплитуда нормального и касательного напряжения, по которым, в свою очередь, вычисляется амплитуда эквивалентного напряжения. Затем, используя корректированную линейную гипотезу

суммирования повреждений, рассчитывают повреждение, накопленное каждой площадкой. Предполагается, что повреждение в каждой из них накапливается независимо и разрушение произойдет по площадке, накопившей наибольшее повреждение. В работах [9–11] сделана попытка распространения этого подхода на произвольный случай моногопараметрического случайного нагружения. В этом случае на каждой из площадок процессы изменения нормальных и касательных напряжений происходят независимо, по случайным законам и приходится вводить искусственное правило суммирования повреждения от нормальных и касательных напряжений, либо рассматривать, в соответствии с одним из подходов, только касательные напряжения. Адекватность такого подхода представляется сомнительной.

3. В работах [12, 13] предложена модель накопления повреждения для случая малоциклической усталости, основанная на применении структурной модели материала. В соответствии с этой моделью, приращение накопленного повреждения определяется выражением:

$$d\omega = K\nu^\beta d\lambda, \quad (1)$$

где K и β – постоянные коэффициенты, определяемые при идентификации модели, $d\lambda$ – параметр Удквиста; $\nu = p_*/r_*$, причем p_* – интенсивность изменения пластической деформации после последнего реверса, r_* – аналогичная интенсивность упругой деформации.

Значения $d\lambda$ и ν получают из решения краевой задачи с помощью структурной модели материала [14]. Предполагается, что элементарный объем конструкции работает подобно набору подэлементов, поверхности текучести которых в девиаторном пространстве описываются сферами Мизеса различного радиуса. Деформации всех подэлементов считаются одинаковыми и равными деформации элемента:

$$\varepsilon_{ij}^k = \varepsilon_{ij}, \quad (2)$$

где $k=1\dots N_e$ – номер подэлемента. Напряжение элемента вычисляется как среднее:

$$\sigma_{ij} = \langle \sigma_{ij}^k \rangle. \quad (3)$$

Отсюда следует, в частности, что для неупругой деформации справедливо выражение:

$$p_{ij} = \langle p_{ij}^k \rangle. \quad (4)$$

Параметры структурной модели находят по диаграмме деформирования материала.

Таким образом, модель характеризуется набором поверхностей текучести (сфер) в пространстве девиатора деформаций. Для недеформированного тела центры этих сфер находятся в начале координат. В процессе деформирования материала происходит перемещение точки e , соответствующей текущей деформации. Когда она достигает какой – либо поверхности текучести и стремится выйти за нее, происходит смещение центра этой поверхности таким образом, чтобы точка e все время находилась на поверхности. Это смещение представляет изменение неупругой деформации dp_k . Соответствующая методика расчета описана в работе [15].

В процессе деформирования материала расчет величины $d\lambda$ производится по формуле:

$$d\lambda = \langle |\Delta p_k| \rangle. \quad (5)$$

Значение v на каждом шаге нагружения определяется как функция числа сместившихся поверхностей текучести n .

4. Рассматриваемый подход позволяет рассчитывать накопленное повреждение для произвольной траектории движения точки, соответствующей текущему значению деформации (т.е. в том числе и при многопараметрическом нагружении) и свободен от недостатков упомянутых выше методов. В связи с этим его предлагается распространить на случай многоциклической усталости. Такая возможность подтверждается тем, что на диаграмме Велера области ограниченной долговечности, соответствующие много- и малоциклическому разрушению, являются различными участками одной и той же кривой. Очевидно, что в этом случае вместо пластических деформаций следует рассматривать микропластические деформации, возникающие при работе материала в практически упругой области и ответственные за накопление повреждений. Для расчета такой пластической деформации может быть использована диаграмма деформирования, описываемая формулой Рамбер–Осгуда [16]

$$r = Ap^m, \quad (6)$$

где A и m – постоянные коэффициенты (характеристики материала), r и p – интенсивность упругой и пластической деформации.

В работе [17] предложена методика определения параметров формулы (A и m) по обычным механическим характеристикам – пределу текучести и пределу прочности. Сопоставление расчетных диаграмм деформирования с экспериментальными для различных сталей и сплавов демонстрирует высокую точность полученных результатов – ошибка обычно не превышает 5 %.

5. Для идентификации модели накопления повреждений (1) обычно приравнивают повреждение, рассчитанное с помощью модели и формулы Коффина:

$$N_f \Delta p^\alpha = C, \quad (7)$$

где N_f – число циклов до разрушения, Δp – интенсивность размаха пластической деформации в цикле, α и C – постоянные. Очевидно, что для получения адекватных результатов в рассматриваемом случае параметры формулы Коффина необходимо определять, исходя из параметров кривой Веллера, связывающей амплитуду напряжений σ_a в симметричном цикле нагружения и число циклов до разрушения в случае многоцикловой усталости:

$$\frac{N_f}{N_0} = \left(\frac{\sigma_{-1}}{\sigma_a} \right)^{m_e}, \quad (8)$$

где N_0 – базовое число циклов, σ_{-1} – предел выносливости, m_e – характеристика материала.

Приравнивая число циклов до разрушения, вычисленное с помощью (7) и (8), и используя выражение (6), получим:

$$N_f = C \Delta p^{-\alpha} = C \left(\frac{\sqrt{6}GA}{2\sigma_a} \right)^{\alpha/m} = N_0 \left(\frac{\sigma_{-1}}{\sigma_a} \right)^{m_e}, \quad (9)$$

$$C = N_0 \left(\frac{2\sigma_{-1}}{\sqrt{6}GA} \right)^{m_e}, \quad \alpha = mm_e. \quad (10)$$

Идентификация модели накопления повреждений (1) – определение значений K и β – выполняется путем приравнивания повреждения за цикл нагружения (симметричный) при однопараметрическом нагружении:

$$\Delta \omega = \frac{1}{N_f} = \frac{\Delta p^\alpha}{C} = 2 \cdot \int_0^{\Delta p} d\omega = 2 \cdot \int_0^{\Delta p} K \cdot v^\beta dp. \quad (11)$$

Расчет накопленного повреждения выполняется для процессов изменения компонентов тензора напряжений, заданных в виде массивов значений. Каждое значение соответствует определенному моменту времени, изменяющемуся с постоянным шагом Δt . Используя известные соотношения, из компонентов тензора напряжений получают значения компонентов девиатора деформаций. По методике [12] для каждого шага нагружения определяют смещение центров поверхностей текучести в девиаторном пространстве и, следовательно, величины v_i , $\Delta \lambda_i$.

В соответствии с (1) на каждом i -м шаге нагружения получают приращение накопленного повреждения

$$\Delta \omega_i = K \cdot v_i^\beta \cdot \Delta \lambda_i. \quad (12)$$

Накопленное повреждение ω рассчитывается как сумма повреждений на каждом шаге нагрузки ($\omega = \sum_i \Delta \omega_i$); критерием разрушения (возникновения усталостной трещины) служит

условие $\omega=1$.

7. Для реализации предлагаемой методики разработан пакет программ и выполнена серия тестовых расчетов; при этом характеристики материала соответствовали углеродистой стали. Рассмотрим некоторые из полученных результатов.

При использовании рассматриваемой методики важным является вопрос о выборе числа подэлементов структурной модели материала. Для решения этого вопроса была выполнена серия расчетов, соответствующих одноосному нагружению симметричным циклом с различным числом подэлементов. Деформации, соответствующие пределу текучести каждого из них, задавались с постоянным шагом вплоть до величины, отвечающей пределу текучести материала. В расчетах варьировалось число подэлементов модели N_e и амплитуда напряжений цикла. Одна из получен-

ных зависимостей относительной долговечности $\eta(N_e)$ представлен на рис. 1. Анализ полученных данных показывает, что при $N_e > 200$ результаты практически совпадают со значениями, соответствующими кривой Велера, по которой выполнялась идентификация модели. В связи с этим в дальнейших расчетах была принята величина $N_e = 200$.

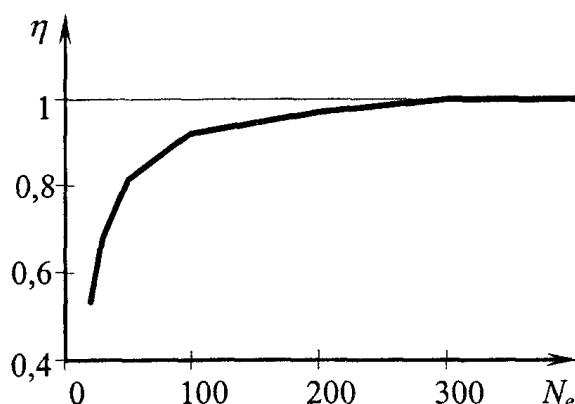


Рис. 1. Зависимость относительной долговечности от числа подэлементов модели

метода полных циклов. Анализ этих данных показывает, что отличие в долговечности не превышает 20%, что следует признать вполне удовлетворительным.

Таким образом, для случаев однопараметрического нагружения предлагаемая модель дает результаты, практически совпадающие с результатами, полученными общепринятыми методами.

8. Проверка модели для случая однопараметрического случайного нагружения выполнялась путем сопоставления результатов с данными, полученными общепринятым методом – методом полных циклов. В качестве нагрузки задавались бигармонические процессы с различным соотношением амплитуд и частот гармонических составляющих, а также случайные процессы различного спектрального состава. В табл. 1 представлены фрагменты некоторых из использованных процессов изменения компоненты девиатора деформаций во времени $e_1(t)$, а также соответствующие им значения относительной долговечности, полученные с помощью предлагаемой модели и

Таблица 1

Результаты тестовых расчетов при однопараметрическом нагружении

№ п/п	Процесс нагружения ($e_2 = e_3 = 0$)	Относительная долговечность	
		Метод полных циклов	Расчет с помощью предлагаемой модели
1		1,00	1,00
2		1,00	0,95
3		1,00	1,19

9. Проверка адекватности модели для случая многопараметрического нагружения осложняется ограниченным объемом экспериментальных данных и отсутствием общепринятых методик расчета. В настоящее время выполнена первая серия тестовых расчетов, соответствующие периодическому нагружению, когда изменяются один или два компонента девиатора деформаций. В табл. 2 представлены три варианта такого нагружения и соответствующие им относительные долговечности. В первом случае рассматривалось однопараметрическое нагружение (изменяется по гармоническому закону только одна компонента девиатора деформаций $e_1(t)$). В двух других случаях изменяются две компоненты девиатора ($e_1(t)$ и $e_2(t)$), причем максимальный размах деформаций за цикл во всех случаях одинаков. Полученные результаты свидетельствуют о том, что предлагаемая модель отображает влияние формы траектории нагружения на накопленные повреждения.

10. Следующая серия тестовых расчетов соответствует упрощенному плоскому напряженному состоянию, когда нормальные и касательные напряжения $\sigma(t)$ и $\tau(t)$ изменяются по гармоническому закону с одинаковой частотой и различным сдвигом по фазе. Такой случай достаточно часто рассматривается в литературе. При синфазном изменения напряжений уравнение кривой, разделяющей области ограниченной и неограниченной долговечности на плоскости $\sigma_a - \tau_a$, имеет вид: $\sigma_{a\text{экв}} = \sigma_{-1}$. Величина эквивалентной амплитуды $\sigma_{a\text{экв}}$ может быть рассчитана по одной из гипотез прочности. Предлагаемая методика соответствует $\sigma_{a\text{экв}} = \sqrt{\sigma_a^2 + 3\tau_a^2}$, т.е. $\tau_{-1} = \sigma_{-1}/\sqrt{3} \approx 0,58\sigma_{-1}$, что близко к реальному соотношению для большинства сталей. Случай нагружения, когда процессы $\sigma(t)$ и $\tau(t)$ сдвинуты по фазе, считаются менее опасными. В частности, для случая сдвига по фазе на 90° в литературе имеется противоречивая информация: в большинстве работ предлагается рассматривать независимое накопление повреждений по σ и τ ; однако в [5] приведены экспериментальные данные, свидетельствующие о том, что накопленное повреждение в этом случае мало отличается от случая синфазного нагружения.

На рис. 2 представлены диаграммы предельных амплитуд и точки, соответствующие предельным амплитудам. Эти зависимости получены с помощью предлагаемой методики для различных случаев нагружения при упрощенном плоском напряженном состоянии. Кривая I соответствует синфазному нагружению, она описывается следующим выражением:

$$\sqrt{\sigma_a^2 + 3\tau_a^2} = \sigma_{-1}. \quad (13)$$

Результаты расчетов, выполненных с помощью предлагаемой модели, ложатся на эту кривую. Кривая II, отвечающая случаю независимого суммирования повреждений, построена для $m_B = 4$ и соответствует соотношению:

$$(\sigma_a/\sigma_{-1})^{m_B} + (\tau_a/\tau_{-1})^{m_B} = 1. \quad (14)$$

Точки 1 получены с помощью предлагаемой модели для программы нагружения 1 (процессы изменения напряжений сдвинуты по фазе на 90°); они располагаются вблизи кривой I, что соответствует экспериментальным данным [5]. Точки 2 (соответствуют программе 2, импульсы нагружения по σ и τ чередуются) расположены около кривой II. Таким образом, рассматриваемая методика отображает влияние на усталостную долговечность относительного сдвига по фазе процессов изменения $\sigma(t)$ и $\tau(t)$ и формы циклов нагружения.

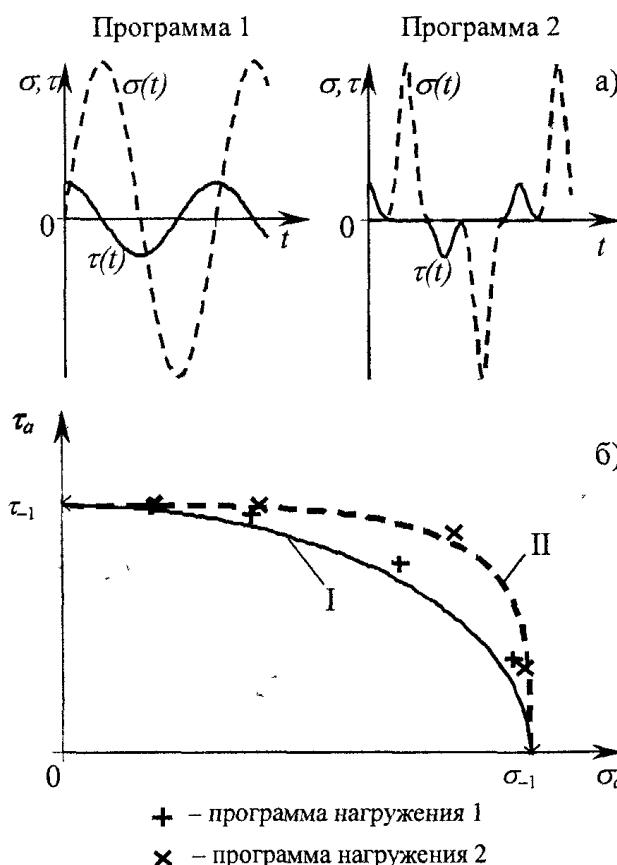
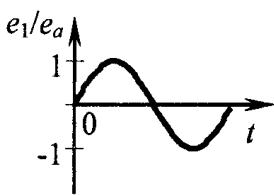
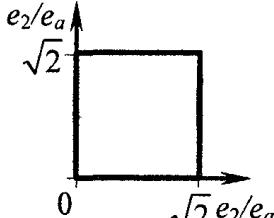
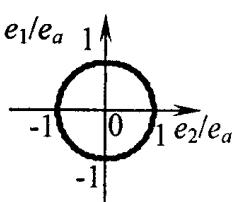


Рис. 2. Программы нагружения (а) и диаграммы предельных амплитуд (б)

10. Представленные результаты тестовых расчетов свидетельствуют, что предлагаемая методика расчетной оценки усталостной долговечности согласуется с общепринятыми методиками и не противоречит экспериментальным данным в рассмотренных случаях нагружения. Проверка адекватности методики будет продолжена с использованием результатов натурных испытаний при многопараметрическом нагружении. В дальнейшем предполагается ее использование для расчетной оценки усталостной долговечности реальных деталей.

Результаты тестовых расчетов

Таблица 2

Цикл нагружения			
Относительная долговечность	1	0,46	0,2

Литература

- Березин И.Я., Абызов А.А. Концепция и методы имитационных ресурсных испытаний мобильной техники (сообщение первое) // Динамика, прочность и износстойкость машин. Международный журнал на электронных носителях. – 1996. – № 2. – С. 61–68.
- Березин И.Я., Абызов А.А. Концепция и методы имитационных ресурсных испытаний мобильной техники (сообщение второе) // Динамика, прочность и износстойкость машин. Международный журнал на электронных носителях. – 1997. – № 3. – С. 73–84.
- Абызов А.А., Березин И.Я., Бывальцев В.И. и др. Применение методики имитационных ресурсных испытаний для оценки ресурса тяжелонагруженных элементов движителя быстроходных гусеничных машин // Инженерная защита окружающей среды в транспортно-дорожном комплексе: Сб. науч. тр. МАДИ (ГТУ). – 2002. – С. 143–154.
- Писаренко Г.С., Лебедев А.А. Деформирование и прочность материалов при сложном напряженном состоянии. – Киев: Наук. думка, 1976. – 415 с.
- Серенсен С.В. Усталость материалов и элементов конструкций. // Избр. тр. Т.2. – Киев: Наук. думка, 1985. – 256 с.
- Березин И.Я. Расчетная оценка долговечности деталей при нестационарном сложном напряженном состоянии // Тр. ЧПИ, вып. №139. – 1974. – С.25–29.
- Сергеев В.Г., Березин И.Я. К расчету ресурса деталей, работающих в условиях нерегулярного нагружения и плоского напряженного состояния // Машиноведение. – 1980. – № 4. – С.67–73.
- Березин И.Я., Гохфельд Д.А., Сергеев В.Г. Прогнозирование долговечности и остаточного ресурса по критериям усталостного разрушения // Материалы XI международного коллоквиума «Механическая усталость металлов». – Киев. – 1991. – С. 27–40.
- Гусев А.С., Никонов В.В., Дмитриченко С.С., Илинич И.М.. О расчете усталостной долговечности при плоском напряженном состоянии // Машиноведение. – 1979. – № 2. – С.81–86.
- Никонов В.В., Илинич И.М., Тетерятников В.Я. Оценка усталостной долговечности металлоконструкций в условиях плоского напряженного состояния // Проблемы прочности. – 1980. – № 12. С.32–39.
- Гусев А.С. Сопротивление усталости и живучесть конструкций при случайных нагрузках. – М.: Машиностроение, 1989. – 248 с.
- Гохфельд Д.А., Кононов К.М., Порошин В.Б., Садаков О.С. К описанию малоцикловой усталости при сложном напряженном состоянии с учетом ползучести // Прочность материалов и элементов конструкций при сложном напряженном состоянии. – Киев: Наук. думка, 1986. – С. 89–93.
- Gokhfeld D.A., Kononov K.M., Poroshin V.B., Sadakov O.S. Coupled Mathematical Models for Cyclic Inelastic Deformation and Damage Accumulation Processes // Trans. 10th Int. Conf. on Structural Mechanics in Reactor Technology (Anaheim, USA, 1989), Vol. L. – P. 19–24.

14. Гохфельд Д.А., Садаков О.С. Пластиичность и ползучесть при переменных нагрузлениях. – М.: Машиностроение, 1984.– 325 с.
15. Гохфельд Д.А., Садаков О.С. Модификации деформационной теории. Принцип подобия при непропорциональном нагружении // Вестник ЮУрГУ. Серия «Машиностроение».– 2001. Вып. 1. – №6(06). – С.16–24.
16. Коллинз Д. Повреждение материалов в конструкциях. Анализ, предсказания, предотвращение. – М.: Мир, 1984. – 624 с.
17. Горский С.В., Кононов К.М. Циклические кривые деформирования конструкционных материалов при повышенных температурах // Прочность машин и аппаратов при переменных нагрузлениях: Тематический сборник научных трудов. – Челябинск: ЧГТУ, 1991. – С. 48–54.

Поступила в редакцию 15 февраля 2005 г.

НАГРЕВ БЕСКОНЕЧНОЙ МЕТАЛЛИЧЕСКОЙ ПЛАСТИНЫ ИМПУЛЬСНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

А.Н. Александров, Е.В. Голубев

В работе рассматривается решение уравнения теплопроводности в пространстве, ограниченном двумя параллельными плоскостями. Решение задачи, учитывающее проникновение оптического излучение в вещество и время релаксации теплового потока, получено в виде интегрального представления для осесимметричного распределения интенсивности. Получена оценка для максимальной избыточной температуры для распределения интенсивности в виде гауссовой функции в пределе бесконечно малой толщины скин-слоя.

В металлах поглощение света обусловлено взаимодействием его с электронами. Возбужденные электроны взаимодействуют с фононами решетки, а также с другими электронами и передают им свою энергию [1]. Среднее время между соударениями электронов (время релаксации электронной подсистемы) в проводнике составляет 10^{-14} – 10^{-13} с [2, 3]. Установление же локального равновесия, когда можно говорить о равенстве температур электронной и фононной подсистем (т.е. о термодинамической температуре вещества), происходит за время порядка $t_r \approx 10^{-11}$ с [2, 4].

Можно считать, что световая энергия мгновенно переходит в тепло для импульсов лазера с модуляцией добротности (и более длительных), однако, в случае поглощения пикосекундных импульсов это допущение оказывается неверным [3]. Закон теплопроводности Фурье должен быть заменен более общим соотношением, которое называется уравнением Каттанео [5]. Согласно [6, 7], уравнение Каттанео учитывает, что тепло распространяется не бесконечно быстро, а с некоторой конечной фазовой скоростью, которая называется скоростью распространения теплового возмущения. Это позволяет описывать реальную ситуацию в случае высокointенсивного и нестационарного процесса нагрева, при которой тепловой поток устанавливается в среде не мгновенно, а характеризуется конечным временем релаксации.

В отечественной научной литературе первое упоминание о времени релаксации теплового потока и конечной скорости распространения теплового возмущения было сделано А.В. Лыковым [7] в 1967 году. Проблеме распространения теплового возмущения посвящено огромное количество работ в отечественной и зарубежной печати (см., например, обзоры [8–10]).

Теория теплопроводности, описывающая процесс быстрого нагрева и охлаждения металла, должна учитывать реальный характер изменения теплофизических свойств материала. Это приводит к необходимости решения нелинейных дифференциальных уравнений. Кроме того, источник теплоты, вследствие изменения поглощающей способности с температурой, дополнительно вносит нелинейность в дифференциальные уравнения. Согласно данным, представленным в [3], при поглощении лазерного импульса длительностью 1 мкс в стали и в меди, коэффициент поглощения изменяется в 5 раз по сравнению с начальным, что приводит к поглощению в мишени большей части энергии оптического импульса.

В данной работе будем рассматривать нагрев излучением однородной пластины, находящейся в равновесном состоянии, учитывая перенос теплоты теплопроводностью и пренебрегая теплоотдачей других видов. Будем предполагать, что физические параметры среды при нагревании не изменяются и фазовых переходов не происходит.

Выберем цилиндрическую систему координат, вдоль оси z которой распространяется импульсное излучение с распределением интенсивности $I(r, t)$. Бесконечная пластина, поглощающая излучение, занимает область $z \in [0, h]$, где h – толщина пластины. Будем считать, что стенки пластины тепло не проводят, а в объеме пластины действуют тепловые источники, плотность которых подчиняется закону Бугера-Ламберта. Распределение избыточной температуры $T(r, z, t)$ является решением уравнения теплопроводности с граничными условиями [6]

$$\frac{\partial^2 T}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + (1-R) \frac{\mu}{\lambda_q} \left[I(r, t) + t_r \frac{\partial I(r, t)}{\partial t} \right] \exp(-\mu z) = \frac{1}{a} \frac{\partial T}{\partial t} + \frac{t_r}{a} \frac{\partial^2 T}{\partial t^2}, -\lambda_q \frac{\partial T}{\partial z} \Big|_{z=0, h} = 0, \quad (1)$$

где r – расстояние от оси z , R – коэффициент отражения, μ – коэффициент поглощения, λ_q – теплопроводность, t_r – время релаксации теплового потока, t – время, a – коэффициент температуропроводности среды.

В результате прямого преобразования Фурье по времени (*) и Бесселя по радиальной координате (~) согласно формулам [11]

$$T(r, z, t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\int_0^{\infty} \tilde{T}^*(\lambda, z, \omega) J_0(\lambda r) \lambda d\lambda \right] \exp(i\omega t) d\omega, \quad (2)$$

где ω – частота, λ – параметр преобразования, J_0 – функция Бесселя первого рода нулевого порядка, подстановки данного представления в исходное уравнение, получаем неоднородное дифференциальное уравнение второго порядка для образа распределения температуры:

$$\frac{\partial^2 \tilde{T}^*}{\partial z^2} - \left[\lambda^2 + \frac{i\omega}{a} - \frac{t_r \omega^2}{a} \right] \tilde{T}^* = -A \frac{\mu}{\lambda_q} (1 + i\omega t_r) \tilde{I}^*(\lambda, \omega) \exp(-\mu z), -\lambda_q \frac{\partial \tilde{T}^*}{\partial z} \Big|_{z=0, h} = 0, \quad (3)$$

где $i = \sqrt{-1}$ и введено для краткости обозначение $A = 1 - R$. Его решение, удовлетворяющее условию равенства нулю плотности теплового потока на поверхностях пластины, имеет вид:

$$\begin{aligned} \tilde{T}^*(\lambda, z, \omega) = & \frac{A\mu(1+i\omega t_r)\tilde{I}^*(\lambda, \omega)}{2\lambda_q\beta_q^2} \frac{e^{\beta_q z} + e^{-\beta_q z}}{e^{\beta_q h} - e^{-\beta_q h}} \left[\frac{\beta_q e^{\beta_q h} + \mu e^{-\mu h}}{\mu + \beta_q} + \frac{\beta_q e^{-\beta_q h} - \mu e^{-\mu h}}{\mu - \beta_q} \right] + \\ & + \frac{A\mu(1+i\omega t_r)\tilde{I}^*(\lambda, \omega)}{2\lambda_q\beta_q} \left[\frac{-\beta_q e^{-\beta_q z} + \mu e^{-\mu z}}{\mu - \beta_q} - \frac{\beta_q e^{\beta_q z} + \mu e^{-\mu z}}{\mu + \beta_q} \right], \end{aligned} \quad (4)$$

где $\beta_q^2 = \lambda^2 + i\omega/a - t_r \omega^2/a$.

Действительная часть выражения (2) определяет температурное поле в пластине. Выражение (4) для образа температурного поля имеет достаточно общий вид и учитывает распределение тепловых источников по объему пластины, а также время релаксации теплового потока. На практике встречается случай поглощения импульсного оптического излучения в пластине из материала с высоким значением проводимости. Такие вещества являются сильно поглощающими средами и тепловыделение происходит вблизи поверхности пластины. При $\mu\sqrt{at_0} \gg 1$, где t_0 – характеристическое время ввода энергии в среду (длительность импульса), можно использовать приближенное выражение для образа температурного поля:

$$\lim_{\mu \rightarrow \infty} \tilde{T}^*(\lambda, z, \omega) = \frac{A\mu(1+i\omega t_r)\tilde{I}^*(\lambda, \omega)}{2\lambda_q\beta_q} \frac{e^{\beta_q(z-h)} + e^{-\beta_q(z-h)}}{e^{\beta_q h} - e^{-\beta_q h}}. \quad (5)$$

При расчете величины избыточной температуры $T(r, z, t)$ для значений времени $h \gg \sqrt{at}$ можно использовать приближение полупространства, которое получается из (4) переходом к пределу бесконечной толщины пластины

$$\lim_{h \rightarrow \infty} \tilde{T}^*(\lambda, z, \omega) = \frac{A(1+i\omega t_r)\tilde{I}^*(\lambda, \omega)}{\lambda_q(1 - \beta_q^2/\mu^2)} \left[\frac{e^{\beta_q z}}{\beta_q} - \frac{e^{\mu z}}{\mu} \right]. \quad (6)$$

Расчет поля избыточной температуры проводился методами численного интегрирования в переменных, нормированных на параметры лазерного излучения и среды:

$$\frac{t}{t_0} = \tau, \frac{t_r}{t_0} = \tau_r, \omega t = \xi, \frac{z}{\sqrt{at_0}} = \chi, \mu\sqrt{at_0} = \gamma, \frac{r}{R_0} = \eta, \frac{R_0^2}{at_0} = \rho_r, \quad (7)$$

где R_0 – радиус лазерного пучка на поверхности пластины. Распределение интенсивности в лазерном импульсе с полной энергией W взято в виде функции Гаусса, как наиболее часто реализуемой на практике:

$$I(r, t) = I_r(r) \cdot I_t(t), I_r(r) = \exp\left(-r^2/R_0^2\right), I_t(t) = \frac{W}{\pi \sqrt{\pi} R_0^2 t_0} \exp\left(-t^2/t_0^2\right). \quad (8)$$

Расчетные зависимости распределения температуры по глубине пластины толщиной $h = 1$ мм в различные моменты времени представлены на рис. 1. Длительность падающего светового импульса $t_0 = 15$ нс, энергия $W = 1$ мДж, радиус $R_0 = 1$ мм. В расчеты заложены параметры железа [12]: $a = 1,78 \cdot 10^{-5}$ м/с², $\lambda_q = 70$ Вт/м°С. Условно полагалось, что коэффициент поглощения $A = 1$, т.е. вся энергия оптического импульса выделяется в виде тепла. На рисунке показано температурное поле при различных значениях времени релаксации теплового потока и фиксированной длительности лазерного импульса: пунктирные линии соответствуют случаю $\tau_r = 0$, сплошные – $\tau_r = 1$. Как показывают расчеты, при $\tau_r < 0,1$ использование уравнения теплопроводности гиперболического типа для описания процесса нагрева металла оптическим импульсом не является оправданным, поскольку распределение температуры с точностью до 1% совпадает с распределением, рассчитанным с помощью классического уравнения теплопроводности параболического типа. При $\tau_r > 1$ в расчетных зависимостях наблюдаются отклонения от закона Фурье, согласно которому тепловые потоки в неравномерно нагретой среде направлены из мест с более высокой температурой в места с более низкой температурой [13].

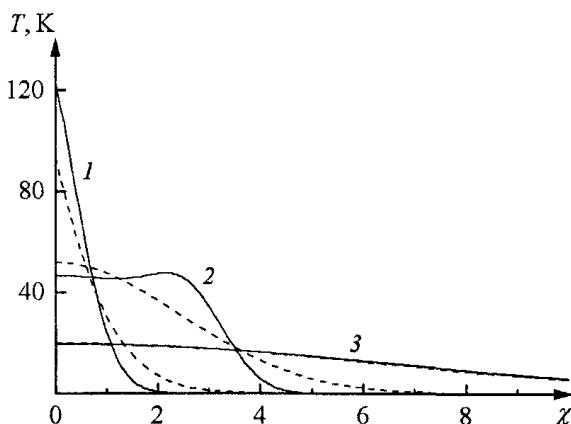


Рис. 1. Распределение температуры по глубине: 1 – $\tau_r = 0$; 2 – $\tau_r = 1$; 3 – $\tau_r = 20$. Сплошная линия – $\tau_r = 1$, пунктир – $\tau_r = 0$

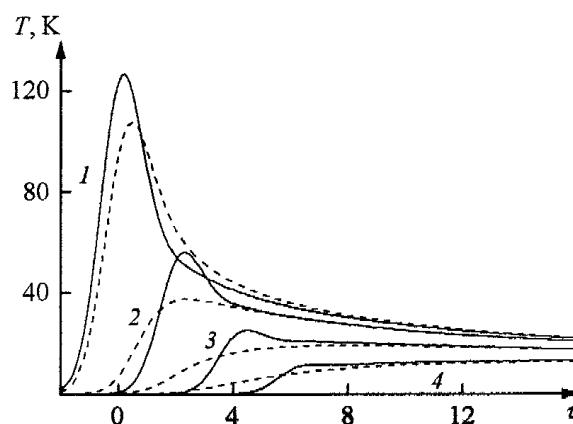


Рис. 2. Зависимости температуры от времени: 1 – $\chi = 0$; 2 – $\chi = 2$; 3 – $\chi = 4$; 4 – $\chi = 6$. Сплошная линия – $\tau_r = 1$, пунктир – $\tau_r = 0$

Приведенные результаты расчета при $\gamma = 50$ показывают, что изменение температуры достаточно велико только для приповерхностных слоев: $\chi < 8$ при $\tau = 3$ (что соответствует 4 мкм при полностью поглощенном оптическом импульсе). Обобщенные зависимости температуры от безразмерного времени τ представлены на рис. 2. Характер кривых зависит от глубины χ , которая в этом случае является параметром. На поверхности полупространства ($\chi = 0$) температура быстро возрастает, достигает максимума и затем уменьшается. На глубине ($\chi > 0$) изменение температуры носит менее ярко выраженный экстремальный характер, значение температуры в максимуме меньше и достигается он позже.

Использованные в работе исходные выражения (2) и (4) достаточно сложны для анализа и расчета параметров поля избыточной температуры. Поставим задачу упростить выражения и получить практически пригодные выражения для оценки температурного эффекта воздействия импульсного излучения. Отношение глубины проникновения тепла за время действия импульса к радиусу лазерного пучка может характеризовать радиальные утечки тепла. При $R_0 \gg \sqrt{at_0}$ попечерным распространением тепла (направления, параллельные поверхности) можно пренебречь [14], и профиль распределения температуры повторяет профиль распределения интенсивности в оптическом импульсе для значений параметра $\tau \ll \rho_r$. В случае несфокусированного импульсного оптического излучения условие $\rho_r \gg 1$ выполнено для большинства металлов. При построении приближенного решения будем считать значение времени релаксации теплового потока пре-

небрежимо малым по сравнению с длительностью оптического импульса и толщину пластинки h много большей чем глубина проникновения тепла за время действия импульса. В этом приближении распределение избыточной температуры по глубине и радиальный профиль можно найти независимо.

Распределение температуры по глубине $T_x(z, t)$ удовлетворяет одномерному уравнению теплопроводности и граничному условию:

$$\frac{\partial^2 T_x}{\partial z^2} + A \frac{\mu}{\lambda_q} I_t(t) \exp(-\mu z) = \frac{1}{a} \frac{\partial T_x}{\partial t}, -\lambda_q \frac{\partial T_x}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0. \quad (9)$$

Решение ищем с помощью интегрального преобразования Фурье по времени. В безразмерных величинах (7) получаем

$$T_x(\chi, \tau) = \frac{A \sqrt{at_0}}{2\pi \lambda_q t_0} \int_{-\infty}^{\infty} I_t^*(\xi) \frac{1+i\xi/\gamma^2}{1+\xi^2/\gamma^4} \left[\frac{\exp(-\chi\sqrt{i\xi})}{\sqrt{i\xi}} - \frac{\exp(-\gamma\chi)}{\gamma} \right] \exp(i\xi\tau) d\xi. \quad (10)$$

Выражение для поперечного профиля распределения температуры получим из уравнения теплопроводности [13], записанного в декартовых координатах x, y

$$\frac{\partial^2 T_\eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T_\eta}{\partial y^2} - \frac{1}{a} \frac{\partial T_\eta}{\partial t} = 0 \quad (11)$$

и начального условия, описывающего распределение температуры на поверхности полупространства в начальный момент времени:

$$T_\eta(x, y, t=0) = \exp\left(\frac{x^2 + y^2}{R_0^2}\right). \quad (12)$$

Решение уравнения (11), согласно [13, 15], получается из начального условия (12) с помощью формулы Пуассона ($t \geq 0$):

$$T_\eta(x, y, t) = \frac{1}{4\pi at} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{(x-u)^2 + (y-v)^2}{4at}\right] T_\eta(u, v, t=0) du dv. \quad (13)$$

После вычисления повторного интеграла, который преобразованием подынтегрального выражения сводится к произведению двух табличных интегралов из [16], и перехода к цилиндрической системе координат, в безразмерных переменных получаем:

$$T_\eta(\eta, \tau) = \frac{\exp\left[-\eta^2(1+4\tau/\rho_r)^{-1}\right]}{1+4\tau/\rho_r}. \quad (14)$$

Приняв временную форму оптического импульса (8) и выделяя действительную часть выражения (10) получаем окончательное выражение для распределения избыточной температуры в полупространстве, выраженное через безразмерные переменные (7):

$$T(\eta, \chi, \tau) = T_\eta(\eta, \tau) \cdot T_x(\chi, \tau) = \theta \cdot T_\eta(\eta, \tau) \cdot [T_{x0}(\chi, \tau) - T_{x1}(\chi, \tau) + T_{x2}(\chi, \tau) + T_{x3}(\chi, \tau)], \quad (15)$$

где

$$\theta = \frac{2WA\sqrt{at_0}}{\pi^2 R_0^2 \lambda_q t_0},$$

$$T_{x0}(\chi, \tau) = \int_0^{\infty} \frac{\exp(-\xi^4/4 - \chi\xi/\sqrt{2})}{1+\xi^4/\gamma^4} \cos(\chi\xi/\sqrt{2} - \xi^2\tau + \frac{\pi}{4}) d\xi,$$

$$T_{x1}(\chi, \tau) = \frac{\exp(-\gamma\chi)}{2\gamma} \int_0^{\infty} \frac{\exp(-\xi^4/4) \cos(\xi\tau)}{1+\xi^4/\gamma^4} d\xi,$$

$$T_{x2}(\chi, \tau) = \frac{1}{\gamma^2} \int_0^{\infty} \frac{\exp(-\xi^4/4 - \chi\xi/\sqrt{2})}{1+\xi^4/\gamma^4} \xi^2 \sin(\chi\xi/\sqrt{2} - \xi^2\tau + \frac{\pi}{4}) d\xi,$$

$$T_{x3}(\chi, \tau) = \frac{\exp(-\gamma\chi)}{2\gamma^3} \int_0^{\infty} \frac{\exp(-\xi^4/4) \xi \sin(\xi\tau)}{1+\xi^4/\gamma^4} d\xi.$$

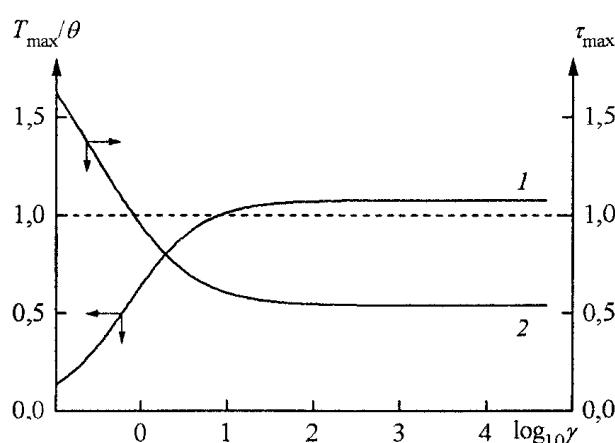


Рис. 3. Максимальная относительная температура для различных значений коэффициента поглощения

Для металлов безразмерный коэффициент поглощения γ принимает значения по порядку величины от 0,1 (лазерный импульс пикосекундной длительности) до 100 (наносекундный импульс). Как видно из рис. 3 (зависимость 1) величина θ является хорошей оценкой для значения максимальной избыточной температуры в среде T_{\max} , обусловленного действием оптического импульса с гауссовой временной формой. При $\gamma > 10$ погрешность такой оценки не превышает 8% поскольку отношение T_{\max}/θ стремится к значению 1,07618 при уменьшении толщины скин-слоя до нуля. Значение времени τ_{\max} , соответствующее $T = T_{\max}$, в этом случае, составляет 0,5409.

Приближенное выражение (15) может быть использовано для оценки величины эффектов, связанных с поглощением оптических импульсов длительностью большей времени релаксации теплового потока вещества (для металлов порядка 10 пс). Максимальная избыточная температура в полупространстве пропорциональна максимальной интенсивности первичного излучения и это объясняется пренебрежением тепловыми потоками в направлениях, параллельных поверхности, в процессе поглощения.

В заключении выясним область определения полученных выражений (2) и (4) по длительности оптического импульса, качественно рассмотрев уравнение теплопроводности (1) и его решение. Анализ решения уравнения теплопроводности, записанного в виде интегрального представления (2) невозможен, однако на основании данных расчета можно сделать следующие выводы. В области малых частот ($t, \omega \ll 1$) получаем зависимости, согласующиеся с выводами теории распространения тепла, положения которой основаны на законе Фурье. В этом случае уравнения (2) и (4) описывает необратимый процесс релаксации теплового возмущения. В пределе больших частот ($t, \omega \gg 1$) гиперболическое уравнение теплопроводности описывает обратимый процесс, при котором температурные возмущения распространяются с конечной скоростью.

Для больших частот выражение (4), вообще говоря, неприменимо. Согласно [17], необходимо учитывать тепловые потоки высших порядков, каждый из которых характеризуется своим временем релаксации, или использовать двухтемпературную модель нагрева среды как это сделано, например, в [1, 18]. Следовательно, область определения полученных выражений ограничивается длительностью оптического импульса порядка времени релаксации теплового потока.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ, в рамках технического задания №01.09.04Ф.

Литература

1. Анисимов С.И., Имас Я.И., Романов Г.С., Ходыко Ю.В. Действие излучения большой мощности на металлы. – М.: Наука, 1970. – 272 с.
2. Григорьев Б.А. Импульсный нагрев излучениями. Т.1. – М.: Наука, 1974. – 320 с.
3. Рэди Дж. Действие мощного лазерного излучения. – М.: Мир, 1974. – 486 с.
4. Миркин Л.И. Физические основы обработки материалов лучами лазера. – М.: Издательство Московского университета, 1975. – 384 с.
5. Carlo Cattaneo «Sulla conduzione de calore». Atti del Semin. e Mat. Fis. Univ. Modena, 1948.
3. 3.
6. Григорьев Б.А. Импульсный нагрев излучениями. Т.2. – М.: Наука, 1974. – 728 с.
7. Лыков А.В. Теория теплопроводности. – М.: Высшая школа, 1967. – 599 с.
8. Joseph D.D., Preziosi L. Heat waves // Rev. Mod. Phys. – 1989. – V.61. – №1. – P.41–73.
9. Joseph D.D., Preziosi L. Addendum to paper «Heat waves» // Rev. Mod. Phys. – 1990. – V.62. – №2. – P.375–391.

10. Jou D., Casas-Vazquez J., Lebon G. Extended irreversible thermodynamics // Rep. Prog. Phys. – 1988. – V.51. – P.1105–1179.
11. Диткин В.А., Прудников А.П. Интегральные преобразования и операционное исчисление. – М.: Физматгиз, 1961. – 524 с.
12. Таблицы физических величин: Справочник. / Под ред. И.К. Кикоина. – М.: Атомиздат, 1976. – 1005 с.
13. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1977. – 736 с.
14. Аполлонов В.В., Прохоров А.М., Хомич В.Ю., Четкин С.А. Термоупругое воздействие импульсно-периодического излучения на поверхность твердого тела // Квантовая электроника. – 1982. – Т. 9. – № 2. – С.343–353.
15. Карташов Э.М. Аналитические методы в теории теплопроводности твердых тел. – М.: Высш. шк., 1985. – 480 с.
16. Двайт Г.Б. Таблицы интегралов и другие математические формулы. – М.: Наука, 1973. – 228 с.
17. Dedeurwaerdere T., Casas-Vazquez J., Jour D. and Lebon G. Foundations and applications of a mesoscopic thermodynamic theory of fast phenomena // Phys. Rev. E. – 1996. – V.53. – №1. – P.498–506.
18. Анисимов С.И., Капелиович Б.Л., Перельман Т.Л. Электронная эмиссия с поверхности металлов под действием ультракоротких лазерных импульсов // ЖЭТФ. – 1974. – Т. 66. – Вып.2. – С.776–781.

Поступила в редакцию 21 марта 2005 г.

К ВОПРОСУ О СУЩЕСТВОВАНИИ ДЕСЯТОЙ ПЛАНЕТЫ

Е.Е. Бирюков

В работе предпринята попытка объяснения распределения обнаруженных транснептуновых объектов действием десятой, пока не открытой, планеты. Было показано, что действием планеты, имеющей значение большой полуоси порядка 60 а.е. несмотря на результаты Брунини и Мелиты, невозможно объяснить наблюдаемое распределение ТНО, как впрочем и возмущениями планеты из внутреннего облака Оорта. Это связано с тем, что времени, проводимого этой планетой вблизи Нептуна недостаточно для возмущения исследуемых орбит и формирования их распределения, близкого к наблюдаемому. Наиболее интересными представляются результаты, полученные действием планеты со значениями большой полуоси в пределах 80–200 а.е. Планета со значением большой полуоси порядка 200 а.е. способствует формированию объектов на сильноэллиптических орбитах со значением большой полуоси большие 80 а.е. С другой стороны, планета со значением большой полуоси порядка 80 а.е. и наклоном около 180° формирует распределение объектов, сильно напоминающее распределение обнаруженных ТНО. В частности, появилось немало объектов, движущихся в резонансе с Нептуном и имеющих большие наклоны.

Введение

Недавно открытый пояс Эджеворта-Койпера дал новую богатую информацию о происхождении малых тел Солнечной системы и взаимосвязи объектов различных классов. Структура этого образования оказалась очень сложной, но можно выделить две основные группы транснептуновых объектов: классический пояс объектов со значениями большой полуоси $a < 50$ а.е. и семейство тел, движущихся по орбитам с эксцентриситетами $0,2 < e < 0,9$ и $a > 50$ а.е. Существование последней группы объектов явилось большим сюрпризом для астрономов, поскольку большие тела не могли образоваться в результате аккреции на орbitах с такими большими эксцентриситетами. К тому же наклоны орбит этих объектов достигают 35 градусов, несмотря на то, что наблюдения сконцентрированы вблизи плоскости эклиптики.

В течение определенного времени эти объекты рассматривались как тела, выброшенные из зоны формирования Нептуна в процессе формирования данной планеты. Однако, более детальное изучение различных моделей происхождения далеких транснептуновых объектов показало, что модель объектов, выброшенных Нептуном, не согласуется с наблюдениями и распределение их орбит не может быть объяснено в рамках возмущений от известных тел Солнечной системы.

1. Теории происхождения и распределения ТНО

С момента обнаружения транснептуновых объектов начались попытки объяснения причин их современного распределения их орбит как по большим полуосям и эксцентриситетам, так и по наклонам. Последние годы ознаменовали собой появление множества теорий, объясняющих динамическую эволюцию пояса Эджеворта-Койпера. Сложности заключаются в том, что если рассматривать влияние всех планет, расположенных на современных орбитах, на классический пояс Койпера, то данные возмущения недостаточны для формирования наблюдаемого распределения транснептуновых объектов. Было исследовано влияние Нептуна и Урана на объекты классического пояса Койпера, расположенные на круговых орбитах и имеющие нулевые наклоны. Время интегрирования составило $4,9 \cdot 10^9$ лет, т.е. время жизни Солнечной системы. В результате не удалось получить объекты на сильноэллиптических орбитах, аналогичных орбите 2000CR105, наклоны орбит исследуемых объектов не превысили 20° , однако, обнаружены объекты с наклоном орбиты, достигающим 45° . В соответствии с теорией, которую развили Дункан и Левисон [1], в заключительной стадии формирования Солнечной системы, образование Урана и Нептуна происходило по пути аккреции массивных планетазималиев в области между Юпитером и Сатурном. Нынешнее распределение транснептуновых объектов является следствием влияния эллиптиче-

ских планетазималиев Урана и Нептуна на «грязный лед», находящийся за 30 а.е. На данный момент установилось предположение, что объекты транснептуновой области состоят из льда – материи кометных ядер [2]. В своей работе они показали, что после прохождения перигелия объекты классического пояса Койпера выбрасываются на сильно эллиптические, относительно устойчивые орбиты с большей вероятностью, чем переместятся к гигантским планетам в планетную зону. На этих орбитах объекты имеют тенденцию к возвращению обратно к Нептуну на последующих прохождениях перигелия. Для объектов с большим значением перигелийного расстояния требуется значительное время (порядка 5 млрд. лет) по истечении которого под влиянием Нептуна объекты могут перейти на орбиты, пересекающие его орбиту.

До недавнего времени эта теория происхождения транснептуновых объектов принималась как основная. Критика этой теории была проведена в работе Гладмана [3]. Эта теория не объясняет появление объектов семейства Плутона, которые ошибочно были объединены с объектами семейства Нептуна. В свою очередь орбиты объектов семейства Плутона объяснить простым влиянием Нептуна невозможно.

Численное доказательство этого утверждения было осуществлено Емельяненко [4], который проанализировав динамическую эволюцию известных объектов на сильно эллиптических орбитах с перигелием порядка 40 а.е. за время 5 млрд. лет под действием гигантских планет, получил, что эти объекты никогда не находились и вблизи Нептуна, потому как его возмущения слишком малы. Однако, не исключил возможности пока не ясного единого механизма динамической эволюции сильно эллиптических объектов семейства Нептуна и Плутона. Таким образом была опровергнута теория наиболее полно отражавшая причины современного распределения ТНО.

Существует ряд ученых, полагающих [5], что наблюдаемое распределение объектов пояса Койпера получилось вследствие прохождения звезды. Траектория звезды относительно Солнца могла быть как параболическая, так и прямолинейная. При возможном прохождении звезды по параболической орбите с расстоянием наименьшего приближения порядка 200 а.е. и наклоном порядка 10° возникали достаточно сильные возмущения, способные выбросить на эллиптические орбиты объекты классического пояса Койпера и способствовать появлению объектов с элементами орбиты аналогичными 2000CR105. Но существуют некоторые сомнения относительно соответствия данной гипотезы действительности. Для столь близкого прохождения звезды по параболической орбите Солнце должно быть сформировано в звездном скоплении. Мы не можем ни подтвердить ни опровергнуть это утверждение, но совершенно однозначно установлено, что на данный момент Солнце не находится ни в каком звездном скоплении [3]. В случае одиночного столкновения Солнца со звездой, согласно [6], можно вычислить минимальное расстояние на котором за время жизни Солнечной системы проходила по крайней мере одна звезда. Количество столкновений Солнечной системы со звездой на расстоянии R равно $N = \pi R^2 n_{star} V_{star}$, где $n_{star} = 0,1 \text{ нк}^{-3}$ – концентрация звезд в межзвездном пространстве, $V_{star} = 20 \text{ км/с}$ – средняя скорость звезд, $t = 4,6 \cdot 10^9$ лет – время жизни Солнечной системы [6]. Если $N = 1$, то это расстояние будет равно

$$R = \sqrt{\frac{1}{\pi} n_{star} V_{star} t} = 1100 \text{ а.е.} \quad (1)$$

Вероятность же прохождения звезды на расстоянии 200 а.е. приблизительно равна 3 %.

Особо в этом ряде предположений и гипотез, объясняющих современное распределение ТНО, стоит версия о существовании одного, а может быть и двух, массивных планетоподобных объектов за орбитой Плутона. Проблемы существования и обнаружения планетоидов в транснептуновом регионе будут рассмотрены ниже. Конец 1980-х и начало 1990-х годов ознаменовались появлением серии работ, объясняющих аномалии в движении Нептуна и Урана возможным существованием десятой планеты [7, 8]. В работе Брунини и Мелиты [9] предпринялась попытка объяснения наблюдаемого распределения ТНО. Отмечая, что на 50 а.е. возмущения от Нептуна незначительны, а также, что эффект динамического трения является достаточным условием сохранения объектов на стабильных орбитах, необходимым условием современного распределения объектов пояса Койпера является наличие какого-либо внешнего возмущения. Заключая, что проходящая звезда, не зависимо от того, проходила она относительно Солнца по прямолинейной траектории или по параболической орбите, не вызывает возмущения, необходимые для формирования наблюдаемого распределения объектов пояса Койпера, приходят к выводу, что единст-

венным возможным механизмом динамического возмущения является десятая планета, располагающаяся за орбитой Нептуна и Плутона.

Это, однако, не означает, что планета была сформирована путем аккреции именно в этом регионе (за орбитой Плутона). Морбиделли доказал невозможность формирования планеты на расстоянии порядка 50 а.е. от Солнца [10]. Согласно результатам Левисона и Дункана [1], Нептун и Уран, скорее всего, также были сформированы не в области современных орбит, а между Юпитером и Сатурном. Подобные результаты были получены в работе Брунини и Мелиты [9]. Из них следует, что планета импакт десятой планеты был выброшен за орбиту Нептуна в момент перехода последнего на орбиту близкую современной. И эта орбита оказалась устойчивой.

Данная работа посвящена исследованию модели в которой современное распределение транснептуновых объектов является следствием влияния планеты или планетоида, расположенного за орбитой Нептуна.

2. Результаты

2.1. Модель

Исследовалось действие планетоида – планетаподобного тела – с варьируемыми элементами орбиты и массой на орбиты исследуемых объектов, расположенных в различных, удаленных от Нептуна, областях. Масса планетоида ограничилась одной массой Земли. Поскольку все планеты Солнечной системы имеют малый угол наклона орбиты к плоскости эклиптики, то наклон орбиты планетоида ограничен двадцатью градусами. В результате предварительных расчетов было обнаружено, что орбита планетоида с отличным от нуля значением аргумента перигелия сильнее возмущает орбиты исследуемых тел в сравнении со случаем нулевого значения аргумента перигелия. Поэтому во всех моделях планетоида принималось ненулевое значение аргумента перигелия его орбиты.

Орбиты исследуемых объектов располагались вблизи орбиты планетоида. Начальные наклоны и эксцентриситеты равнялись нулю, аргументы перигелия и восходящего узла, средняя аномалия являлись случайными числами, равномерно распределенными в пределах (0 – 360°). Время интегрирования составило $4,6 \cdot 10^9$ лет, что составляет время жизни Солнечной системы. Элементы орбит исследуемых объектов записывались через 1000 оборотов. Ввиду того, что большинство транснептуновых объектов находятся не на стационарных орbitах, при анализе распределения орбит объектов, полученного влиянием планетоида на исследуемые тела, рассматривали орбиты тел, получаемые в процессе динамической эволюции через каждые 1000 оборотов. Вычисления проводились симплектическим интегратором Емельяненко.

Для оценки соответствия распределения объектов на квазистационарных орбитах для разных моделей планетоида учитывалось несколько критериев, характерных для наблюдаемого распределения ТНО. В частности, как видно из рис. 1, на котором представлена зависимость эксцентриситетов от большой полуоси, нижний предел перигелийных расстояний ограничен 30 а.е., что соответствует положению Нептуна.

Верхний предел перигелийных расстояний в области пояса Койпера ограничен значением в 47 а.е., для объектов на сильно эллиптических орбитах меньше и соответствует примерно 45 а.е. Вполне возможно, что с развитием наблюдательной техники максимальный предел перигелийных расстояний для этих объектов увеличится. Еще одной особенностью распределения транснептуновых объектов является отсутствие тел с малыми эксцентриситетами в области за 50 а.е. По крайней мере, мы это можем утверждать для области до 70 а.е., что примерно соответствует предельному расстоянию на котором возможны наблюдения малых объектов (с диаметром меньше 100 км.) [11]. На рис. 2 представлена зависимость наклона обнаруженных объектов от большой полуоси. Легко заметить, что наклон орбит обнаруженных объектов не зависит от значения большой полуоси и для всех значений большой полуоси максимальный наклон ограничен значением $\sim 40^\circ$. Однако, это ограничение может быть связано не со строением пояса Койпера, а наблюдательной селекцией. Из гистограммы распределения ТНО по наклонам (рис. 3) видно, что наибольшее количество транснептуновых объектов имеют орбиты с малым углом наклона. При этом существует множество тел с наклоном орбиты больше 35° . Важным критерием при оценке пригодности модели планетоида является наличие объектов на сильно эллиптических орбитах с перигелиями в пределах 32–45 а.е. со значениями больших полуосей в пределах 60–250 а.е. (рис. 4).

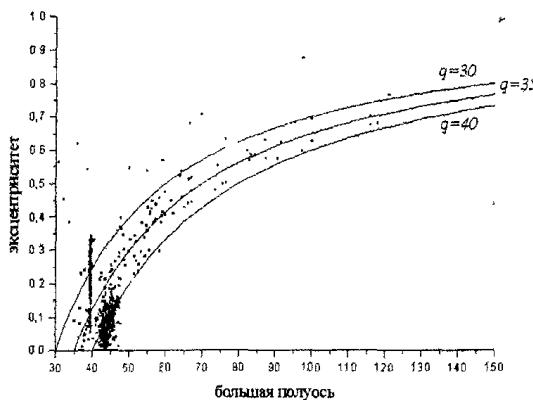


Рис. 1. Зависимость эксцентриситетов орбит от больших полуосей. Наблюданное распределение

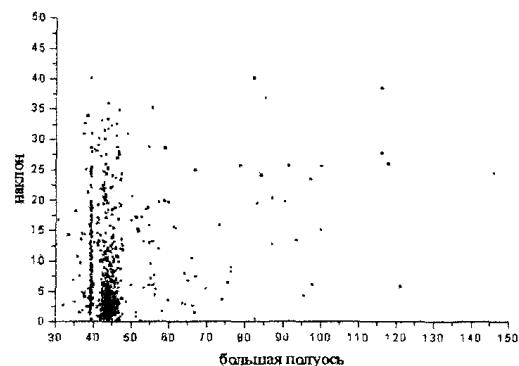


Рис. 2. Зависимость наклонов орбит от больших полуосей. Наблюданное распределение

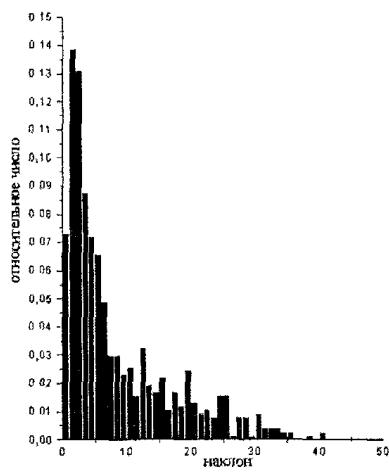


Рис. 3. Распределение орбит ТНО по наклонам

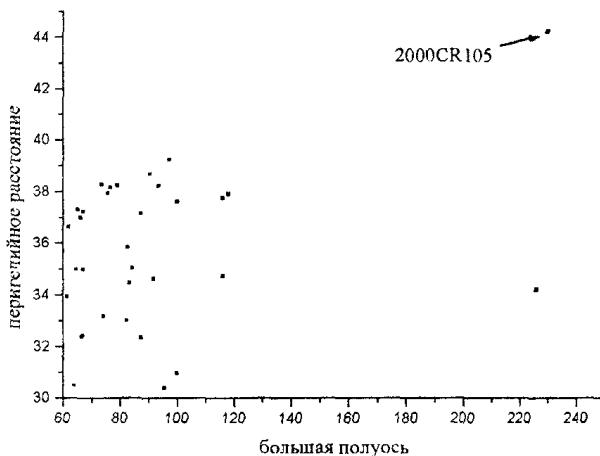


Рис. 4. Зависимость перигелийных расстояний орбит от больших полуосей. Наблюданное распределение

2.2. Планетоид на 60 а.е.

Одной из попыток объяснения наблюдаемого распределения ТНО явилась модель планетоида с элементами орбиты, аналогичными используемым в работе Брунинии и Мелиты [9]: большая полуось $a = 60$ а.е., перигелийное расстояние $q = 54$ а.е. На рис. 5, рис. 6 и рис. 7 представлены результаты расчетов для планетоида с наклоном орбиты $i = 10^\circ$, аргументом перигелия $\omega = 10^\circ$ и массой $M = M_\oplus$. Возмущающие тела находились на круговых орбитах с большими полуосями, распределенными равномерно в пределах 40–100 а.е. с нулевыми наклонами.

Из рис. 5 видно, что в распределении имеется избыточная концентрация объектов в области значений перигелийного расстояния, равного 60 а.е., что соответствует большой полуоси возмущающего тела. Также видно, что планетоид способствует появлению объектов на сильно эллиптических орбитах («SDO»). Около 0,6 процентов первоначального состава можно отнести к данной группе тел. При этом, перигелийное расстояние не приблизилось к значениям, характерным для объектов на сильно эллиптических орбитах с перигелийным расстоянием порядка 40 а.е., как у знаменитого 2000CR105 ($q = 43$ а.е.). В то же время в процессе интегрирования всего 19 процентов от первоначального количества объектов попало в планетную область с $q < 30$ а.е. или попали на сильно эллиптическую орбиту с $a > 200$ а.е. Согласно современным исследованиям [9, 12], существующее количество транснептуновых объектов составляет примерно сотую часть от первоначального состава. Это обуславливается тем, что для роста вследствие акреции пары Плутон-Харон первоначальная масса должна быть на два порядка выше современной.

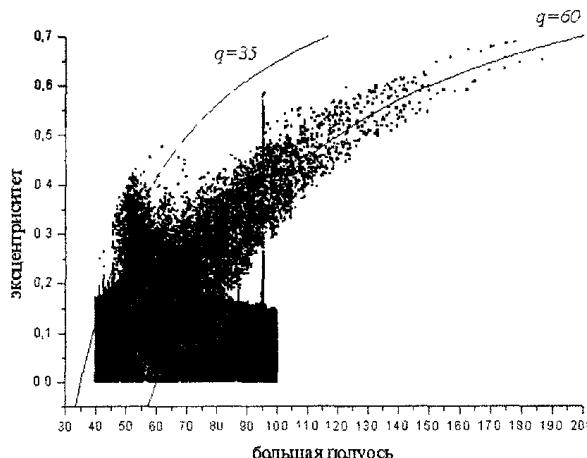


Рис. 5 Зависимость эксцентриситетов орбит от больших полуосей. Планета с $M=M_{\oplus}$, $i = 10^\circ$, $\omega = 10^\circ$, $a = 60$ а.е., $q = 54$ а.е.

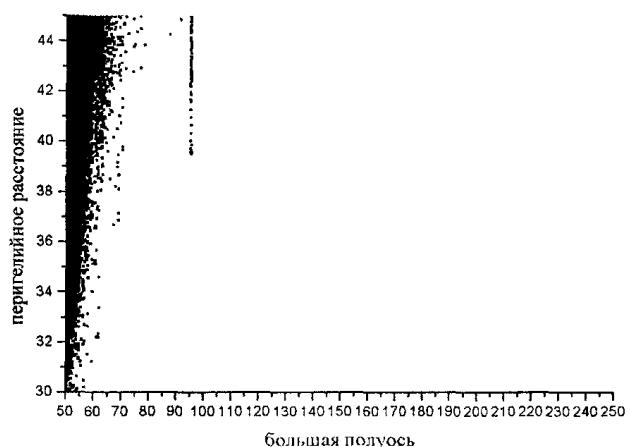


Рис. 6. Зависимость перигелийных расстояний орбит от больших полуосей. Планета с $M=M_{\oplus}$, $i = 10^\circ$, $\omega = 10^\circ$, $a = 60$ а.е., $q = 54$ а.е.

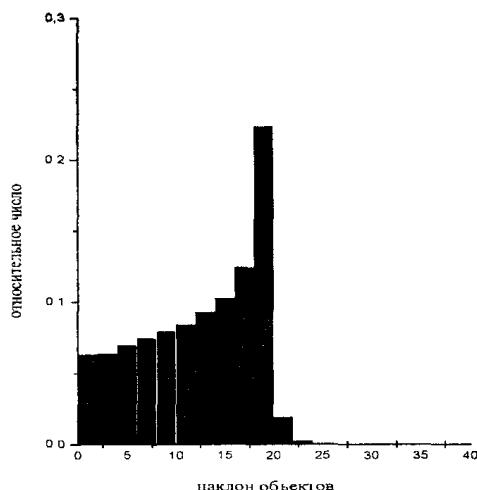


Рис. 7. Распределение наклонов орбит.
Планета с $M=M_{\oplus}$, $i = 10^\circ$, $\omega = 10^\circ$

Сейчас полагают [10], что суммарная масса транснептуновых объектов $\sim 0,3M_{\oplus}$. В результате расчетов получено, что наклоны орбит объектов не превышают 30° , хотя на данный момент было обнаружено достаточно много объектов с наклоном больше 35° . Хотелось бы обратить внимание на то, что объекты с первоначальным значением большой полуоси более 75 а.е. практически не испытали возмущений.

При увеличении наклона возмущающего тела до 20° и аргумента перигелия до 20° , картина распределения исследуемых объектов меняется незначительно. Однако наклоны орбит достигают 46° , при этом отсутствуют объекты на сильно эллиптических орбитах, и разрушению подверглось всего 10% первоначального состава объектов.

На рис. 8 и рис. 9 представлены результаты для тех же самых элементов орбиты возмущающего тела, с массой $M = 0,3M_{\oplus}$. В данном случае ввиду малой массы планетоида мы ограничились рассмотрением влияния на классический пояс Койпера (большая полуось в пределах от 40 а.е. до 45 а.е.).

Из распределения объектов видно, что массы Марса недостаточно для формирования наблюдаемого распределения ТНО. Наклоны орбит объектов не превышают 22° (рис. 9). Большинство объектов сгруппировались по перигелиям вблизи 35 а.е. (рис. 8), и появился только один объект с сильно эллиптической орбитой и то с перигелийным расстоянием вблизи орбиты Нептуна ($a = 400$ а.е., $q = 31,5$ а.е., $i = 7,5^\circ$), при этом разрушению подверглось всего 25% от первоначального состава количества объектов.

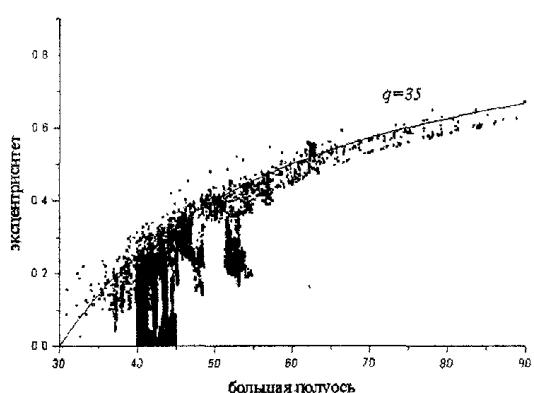


Рис. 8. Зависимость эксцентриситетов орбит от больших полуосей. Планета с $M = 0,3M_{\oplus}$, $i = 10^\circ$, $\omega = 10^\circ$, $a = 60$ а.е., $q = 54$ а.е.

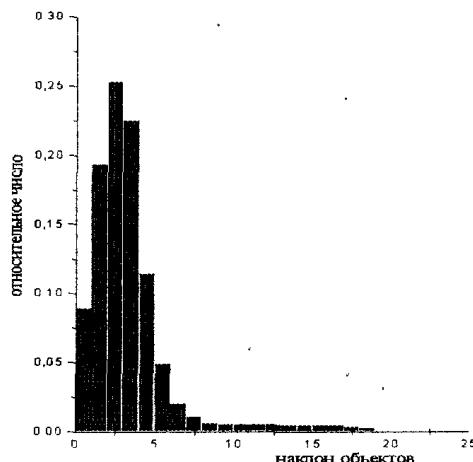


Рис. 9. Распределение наклонов орбит. Планета с $M=M_{\oplus}$, $i = 10^\circ$, $\omega = 10^\circ$, $a = 60$ а.е., $q = 54$ а.е.

Хотелось бы обратить внимание на то, что во всех трех описанных моделях варьировались элементы орбиты и масса десятой планеты, распределения исследуемых объектов в области наблюдаемых тел на сильно эллиптических орбитах (перигелийное расстояние в пределах 32–45 а.е., большая полуось 60–250 а.е.) аналогичны и не соответствуют наблюдаемому. Эксцентриситеты исследуемых тел не превышают 0,5 (рис. 7). Например, обнаружены объекты с перигелийным расстоянием порядка 35 а.е. и большой полуосью порядка 100 а.е. (рис. 4), однако, они отсутствуют во всех трех моделях.

Во всех моделях планеты с большой полуосью порядка 60 а.е. эксцентриситеты объектов не превышают 0,5. При этом объекты из резонансной зоны 2:5 с Нептуном не сохранились. Распределение орбит объектов по наклонам также далеко от наблюдаемого. Даже если учесть, что основные наблюдения ведутся вблизи плоскости эклиптики, маловероятно, что реальное распределение объектов по наклонам соответствует полученному (рис. 6).

Таким образом, ни одна модель планеты на 60 а.е. не способна объяснить наблюдаемое распределение ТНО. Планета с большой массой вызывает настолько сильные возмущения, что из области классического пояса Койпера выбрасывает практически все объекты, но при этом не появляются тела на сильно эллиптических орбитах с перигелийным расстоянием порядка 34 а.е. и эксцентриситетом больше 0,5 (рис. 7).

Как уже отмечалось, аналогичная модель исследовалась Брунини и Мелитой [9], однако их результаты оказались несколько другими. В своей статье они показали, что новая планета с массой Марса, большой полуосью 60 а.е., перигелийным расстоянием 54 а.е. и наклоном 10 градусов достаточно хорошо объясняет современное распределение транснептуновых объектов. В данной работе было показано, что массы Марса недостаточно для формирования объектов на сильно эллиптических орбитах. Дело в том, что они использовали другой способ интегрирования: вычисляли возмущения от планеты только в случае попадания объекта в его сферу действия. Конечно, данный метод способствует уменьшению времени интегрирования, однако приводит к неточным результатам.

2.3. Планетоид на 200 а.е.

Возможность существования планетоида за 100 а.е. может объясняться наличием обрыва в значениях больших полуосей в распределении ТНО за 120 а.е. и их появление в области около 200 а.е. Данное предположение было рассмотрено путем введения планетоида с большой полуосью орбиты 200 а.е., перигелийным расстоянием 180 а.е., наклоном и аргументом перигелия по 10 градусов и массой равной одной массе Земли. Большие полуоси для исследуемых тел располагались в пределах 180–200 а.е. Традиционно считается, что пояс Койпера ограничен по значениям большой полуоси примерно 50 а.е. [11] и на расстоянии 200 а.е. от Солнца отсутствуют тела на круговых орbitах.

Предположение о том, что пояс Койпера простирается дальше и имеются объекты на круговых орбитах с большой полуосью, превышающей 70 а.е., выдвинул Гладман [3], расширив пояс Койпера на большее расстояние от Солнца. Отсутствие обнаруженных объектов с круговой орбитой на расстоянии порядка 70 а.е. он объяснил сложностью наблюдения.

В результате расчетов получилось, что под действием планеты появилась избыточная концентрация объектов вблизи ее орбиты: с перигелийным расстоянием 200 а.е. а так же с афелийным расстоянием ~ 250 а.е. (рис. 10).

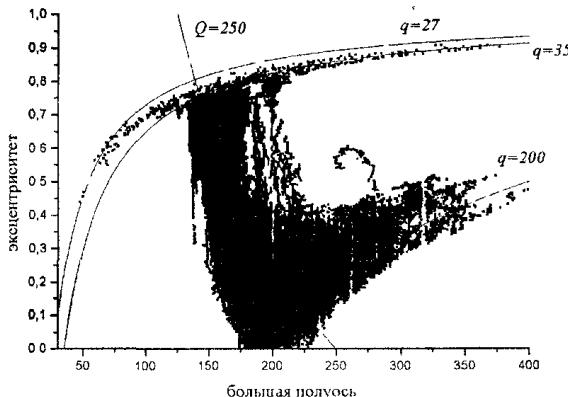


Рис. 10. Зависимость эксцентриситетов орбит от больших полуосей. Планета с $M=M_{\oplus}$, $i = 10^\circ$, $\omega = 10^\circ$, $a = 200$ а.е., $q = 180$ а.е.

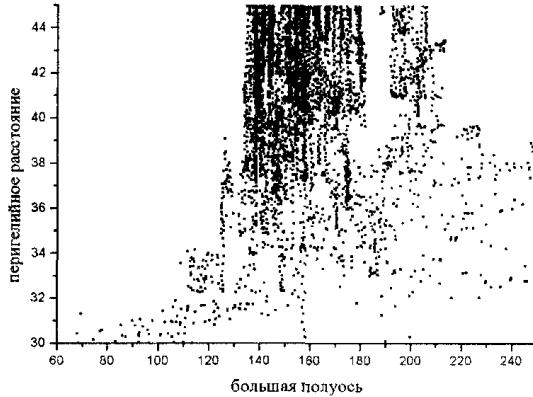


Рис. 11. Зависимость перигелийных расстояний орбит от больших полуосей. Планета с $M=M_{\oplus}$, $i = 10^\circ$, $\omega = 10^\circ$, $a = 200$ а.е., $q = 180$ а.е.

Из анализ распределения орбит объектов можно сделать вывод о том, что данной планетой возможно объяснить существование транснептуновых объектов на сильно эллиптических орбитах с перигелийными расстояниями в пределах 32–44 а.е. (рис. 4). Например, появились объекты, аналогичные 2000CR105, или 2001FP185. Однако в результате расчетов вообще отсутствуют объекты со значениями большой полуоси порядка 60 а.е. и перигелийным расстоянием в пределах 30–45 а.е. (рис. 11).

2.4. Планетоид из внутреннего облака Оорта

Предположение о существовании массивного тела – планетоида – из внутреннего облака Оорта, имеющего сильно эксцентрическую орбиту и значительную массу, явилось бы хорошей, все объясняющей и не нарушающей никакие современные космогонические представления, теорией. Имея большую полуось в области облака Оорта, данное тело имело бы значительный период обращения вокруг Солнца, и вопрос обнаружения данного тела можно было бы не рассматривать. Важным моментом является возможность любых наклонений планеты, поскольку она являлась бы телом из внутреннего облака Оорта, имеющего изотропное распределение [6]. Однако, данная модель не объясняет причины современного распределения объектов пояса Койпера. Была проведена серия расчетов для численного исследования данной модели. При расчетах масса планетоида варьировалась до массы Нептуна, а наклон варьировался до 90° , поскольку облако Оорта является сферическим. Ввиду того, что проходящие звезды могут выбросить планетоид на гиперболическую орбиту, время интегрирования было ограничено 500 миллионами лет, что примерно соответствует времени между тесными сближениями Солнца с проходящими звездами [6]. По истечении 500 миллионов лет планетоид не внес существенных изменений в динамическую эволюцию транснептуновых объектов. Конечное распределение объектов практически совпало с распределением, получающимся в результате действия одного Нептуна. Наклоны объектов не превысили 20 градусов, совершенно отсутствуют объекты на сильноэллиптических орбитах. По всей вероятности это объясняется тем, что кратковременные возмущения на внешнюю часть Солнечной системы, даже под действием тела с массой в несколько земных масс, не способны значительно возмутить круговые орбиты малых тел на расстоянии в пределах 40–50 а.е. от Солнца и способствовать формированию современного пояса Койпера.

2.5. Планетоид на 100 а.е.

Если посмотреть на распределение объектов, получаемое действием планетоида, имеющего большую полуось 200 а.е., то можно предположить, что если его поместить несколько ближе, то распределение объектов должно сместиться в сторону меньших значений большой полуоси. Было рассмотрено влияние планетоида со значением большой полуоси 100 а.е., перигелийным расстоянием 85 а.е. и наклоном 20° на объекты, расположенные на круговых орбитах и значениями больших полуосей в пределах 40–100 а.е. Как видно из рис. 12, данная модель достаточно хорошо объясняет существование объектов на сильноэллиптических орбитах со значениями большой полуоси порядка 200 а.е. С другой стороны, объекты из резонансной области 2:5 с Нептуном со значением большой полуоси орбиты порядка 54 а.е. и малыми значениями перигелийного расстояния не сохранились (рис. 13).

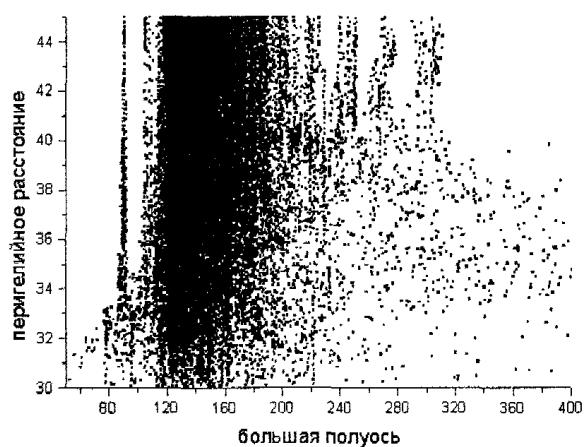


Рис. 12 Зависимость перигелийных расстояний орбит от больших полуосей. Планета с $M=M_{\oplus}$, $i=20^\circ$, $\omega=10^\circ$, $a=100$ а.е. $q=85$ а.е.

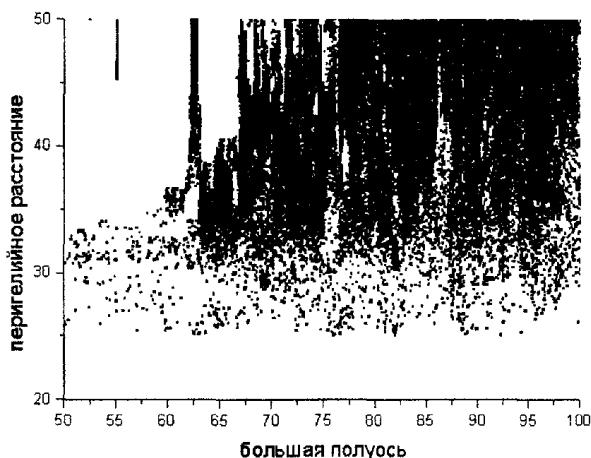


Рис. 13 Зависимость перигелийных расстояний орбит от больших полуосей. Планета с $M=M_{\oplus}$, $i=20^\circ$, $\omega=10^\circ$, $a=100$ а.е. $q=85$ а.е.

Если наклон планетоида положить равным 160° (обратное движение планеты), это приводит к тому, что результаты существенно меняются (рис. 14 и рис. 15). Было рассмотрено влияние планетоида со значением большой полуоси 80 а.е. и перигелийным расстоянием 60 а.е. на то же первоначальное распределение объектов. Большие полуоси и перигелийные расстояния исследуемых тел в области до 60 а.е. не испытали существенного влияния от планеты.

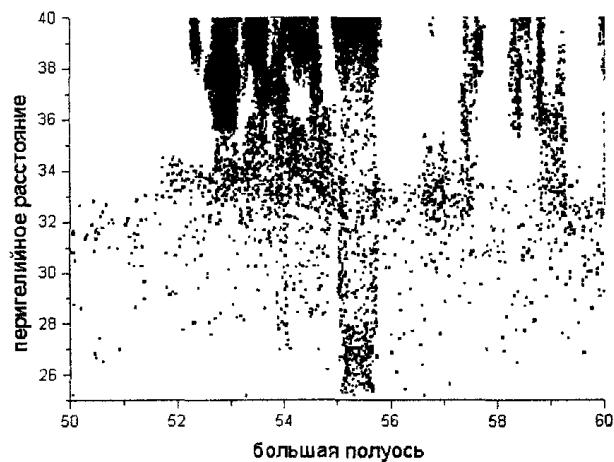


Рис. 14. Зависимость перигелийных расстояний орбит от больших полуосей. Планета с $M=M_{\oplus}$, $i=160^\circ$, $\omega=10^\circ$, $a=80$ а.е. $q=60$ а.е.

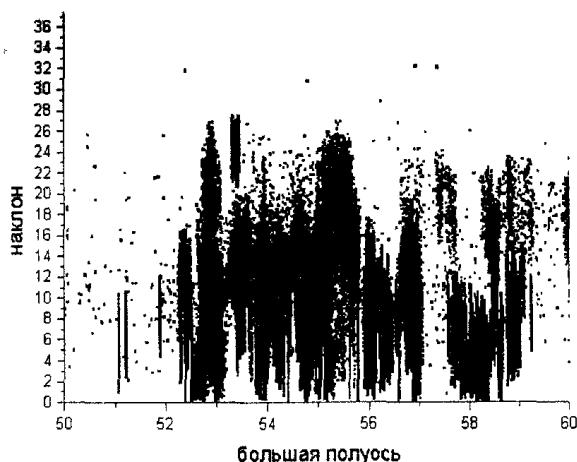


Рис. 15. Зависимость наклонов орбит от больших полуосей. Планета с $M=M_{\oplus}$, $i=160^\circ$, $\omega=10^\circ$, $a=80$ а.е. $q=60$ а.е.

То есть все обнаруженные резонансные объекты в области до 60 а.е. сохранились. При этом, наклоны тел достигли 36° . Это явилось следствием того, что в случае обратного движения планетоида, исследуемые тела испытывают достаточно кратковременное воздействие со стороны планеты и элементы их орбит не претерпевают существенного изменения. Но этого воздействия достаточно для изменения наклонов орбит этих тел. Действием одного только Нептуна столь высокие наклоны тел объяснить невозможно. При численном моделировании, как уже говорилось выше, Нептун способен вызвать наклоны объектов не выше 15° в то время как обнаружены объекты в резонансе с Нептуном 2:5 и наклонами до 30° . У обнаруженных объектов в резонансной области со значением большой полуоси в пределах 55–56 а.е. наклоны тел с перигелийным расстоянием до 35 а.е. действительно невелики и не превышают 10° , что объясняется тем, что эти объекты появились вследствие влияния Нептуна. Но наклоны объектов с большим перигелийным расстоянием достигают 30° , что может объясняться только внешним влиянием.

Заключение

Таким образом было показано, что ни одна модель новой планеты не в состоянии в полной мере объяснить распределение обнаруженных транснептуновых объектов. Таким образом, наиболее предпочтительным выводом будет предположение о том, что у транснептуновых объектов различная динамическая эволюция. Планета, расположенная на расстоянии порядка 60 а.е. не способна сформировать наблюдаемое распределение орбит тел. Как было продемонстрировано, планета на таком расстоянии или выбрасывает тела на сильноэллиптические орбиты со значением большой полуоси порядка 1000 а.е. или способствует захвату этих объектов Нептуном. При этом объекты со значением эксцентриситета больше 0,5 и перигелийным расстоянием в пределах 30–60 а.е. не появились в результате расчетов. На существование планеты на расстоянии порядка 60 а.е. настаивали Брунини и Мелита, но они в своей работе использовали упрощенные методы вычисления: вычисляли возмущения от планеты только в случае попадания объекта в поле действия планеты. Однако, в связи с тем что во внешней части Солнечной системы влияние Солнца и больших планет незначительно, то необходимо учитывать все возмущения, сколь малыми они бы не были.

Модель планеты, приходящей из облака Оорта также не дала ощутимого результата. Видимо времени, проводимого планетой вблизи планетной области недостаточно для формирования распределения, эквивалентного наблюдаемому.

Помещение планеты на 200 а.е. ($a = 200$ а.е., $q = 180$ а.е.) приводит к тому, что исследуемые объекты либо переходят на орбиты малым значением перигелийного расстояния (порядка 30 а.е.), либо с большим (порядка значения большой полуоси планеты). На расстоянии порядка 200 а.е. возмущения от Нептуна отсутствуют и поэтому в данной области объекты испытывают возмущения только от планеты. Под действием этих возмущений формируются объекты, орбиты которых напоминают орбиты 2000CR105 или Седны. (рис. 11). С другой стороны, под действием возмущений планеты на 200 а.е. невозможно получить так называемые SDO. Вполне возможно, что имеется многое больше объектов с элементами орбит аналогичными 2000CR105, и можно с достаточной долей уверенности сказать, что у объектов на сильноэллиптических орbitах с большим значением большой полуоси динамическая эволюция отличается от эволюции так называемых SDO. Скорее всего, 2000CR105 и Седна получились вследствие действия массивного тела, находящимся на расстоянии порядка 200 а.е.

Наиболее предпочтительной является модель планеты, расположенной в на расстоянии порядка 100 а.е. Если поместить планету несколько ближе ($a = 100$ а.е., $q = 85$ а.е.), то это приводит к тому, что планета выбрасывает тела из области резонанса 2:5. Однако, если наклон планеты положить равным 160° , в результате формируется распределение орбит объектов, практически эквивалентное наблюдаемому для тел на сильно эллиптических орбитах и для резонансов. Например, самый значительный резонанс с Нептуном 2:5. У объектов, движущихся в этом резонансе наклоны достаточно велики, однако, как уже упоминалось, Нептун не способен сформировать объекты со значением угла наклона орбиты больше 15° . Однако, в данной модели объекты, аналогичные 2000 CR105 или Седна не получились.

Таким образом, хотелось бы сделать несколько выводов. Скорее всего, в Солнечной системе имеется достаточно массивное тело, чтобы назвать его планетой. Похоже, что планета должна

совершать обратное движение, хотя это странно, поскольку у орбит всех планет Солнечной системы наклоны невелики. Вполне возможно, что большая полуось этой планеты порядка 100 а.е., а перигелийное расстояние порядка 85 а.е. Вполне возможно, что эта планета сейчас находится в афелии и обнаружить ее не представляется возможным. Довольно большим допущением будет являться предположение о существовании второй неизвестной планеты на расстоянии порядка 200 а.е. Как было продемонстрировано, ни одна модель планеты не в состоянии объяснить видимое распределение ТНО. Две планеты, одна из которых располагается на расстоянии порядка 90 а.е. и имеет обратное движение, а вторая располагается на расстоянии порядка 200 а.е. достаточно хорошо объясняют видимое распределение ТНО. Данный вывод вполне согласуется с предположением Радзивского о существовании в Солнечной системе планеты с обратным движением и возможном существовании еще одной планеты на более удаленном от Солнца расстоянии [13]. В любом случае планету следует искать в той области, где будет наблюдаться избыточная концентрация перигелиев орбит обнаруженных ТНО.

Данная работа была поддержана грантами ИНТАС (00-240), РФФИ-Урал (04-02-96042) и Правительством Челябинской области.

Литература

1. Thomes E.W., Duncan M.J., Levison, H.F. The Formation of Uranus and Neptune among Jupiter and Saturn // Astron. J. – 2002. – V.123. – P. 2862–2883.
2. Weissman P.R. The Kuiper belt // Astr. And Astrophysics. – 1994. V.215. P. 1–23.
3. Gladman B, Kavelaars J.~J., Morbidelli A., Holman M.~J., Loredo T. The structure of the kuiper belt: size distribution and radial extent // Astron. J. – 2001. – V.122. – P. 1051–1066.
4. Emel'yanenko V.V. Asher D. Bailey M.E. A new class of trans-Neptunian objects in high-eccentricity orbits// Monthly Notices Royal Astronomical Society – 2003. – V.338. – P.443–451.
5. Kobayashi, Hiroshi, Ida, Shigeru The Effects of a Stellar Encounter on a Planetesimal Disk // Icarus. – 2001. – V.153. – P.416–429.
6. Марочник Л.С. Свидание с кометой. – М.: Наука, 1985. – 82с.
7. Garryngton R.S. The location of planet X // Astron.J. – 1988. – V.96. – P. 1476–1478.
8. Brunini A. A theoretical dynamical limit of planet X's based on its perturbations on Urans and Neptune // Astron.Astrophys. – 1992. – V.265. – P. 324–327.
9. Brunini A., Melita M.D. The existence of a planet beyond 50 AU and the orbital distribution of the СЕКВО // Icarus, 2002. – V.160. – P. 32 – 43.
10. Morbidelli A., Jacob C. Planetary embryos never formed in the Kuiper belt // Icarus. – 2001. – V.152. – P.241–248.
11. Melita M.D., Brunini M. The edge of the Edgeworth-Kuiper belt // Astron. J. – 2002. – V.125. P. 1389–1397.
12. Воронцов-Вельяминов Б.А. Очерки о вселенной. – М.: Наука, 1980. – 175 с.
13. Радзивский В.В. О существовании трансплутоновых массивных тел с обратным движением // Анализ движения тел Солнечной системы и их наблюдение, ЛатГУ. – 1986. – С. 126–141.

Поступила в редакцию 10 сентября 2004 г.

ТЕМПЕРАТУРНЫЕ ИЗМЕНЕНИЯ СТРУКТУРЫ ЖИДКОГО ЖЕЛЕЗА

А.Г. Воронцов, Д.К. Белащенко

В статье проведено исследование атомных моделей расплава железа при температурах от 1833 до 2023 К. Анализ атомной структуры методом Вороного–Делоне показал, что при температурах 1833–1923 К структура изменяется незначительно, в то время как в диапазоне температур 1923–2023 К происходят ощутимые изменения. Около температуры плавления велика доля плотноупакованных фрагментов, а при температуре 2023 К жидкое железо приближается к модели случайной плотноупакованной жидкости.

Введение

Вопреки существовавшему несколько десятилетий назад мнению, сейчас известно, что расплавы металлов претерпевают существенные изменения структуры при нагреве, что чрезвычайно важно для решения прикладных задач материаловедения. Основные трудности при определении изменений в расплавах металлов связаны с их постепенностью и малым количеством экспериментальных данных. Высокие температуры и повышенная реакционная способность сильно затрудняют постановку качественных экспериментов. Появление мощных компьютеров сделало возможным получение компьютерных моделей структуры расплава, воспроизводящих доступные экспериментальные данные по структуре. Это открыло дорогу для анализа изменений происходящих в расплавах и качественном их понимании.

Целью этой работы является исследование моделей расплава железа в диапазоне температур 1833–2023 К с помощью статистико-геометрических методов и определение структурных изменений в нем.

Метод

Для исследования температурных изменений расплава Fe были использованы модели, построенные по данным дифракционного эксперимента методом Реатто [1]. В этом методе парный атомный потенциал выбирается так, чтобы метод молекулярной динамики с этим потенциалом правильно воспроизводил функцию радиального распределения, известную из эксперимента. Были получены модели, содержащие 4000 атомов. Сравнение экспериментальных и модельных функций радиального распределения для двух температур приведено на рис. 1. Экспериментальная и модельная функции радиального распределения практически неразличимы.

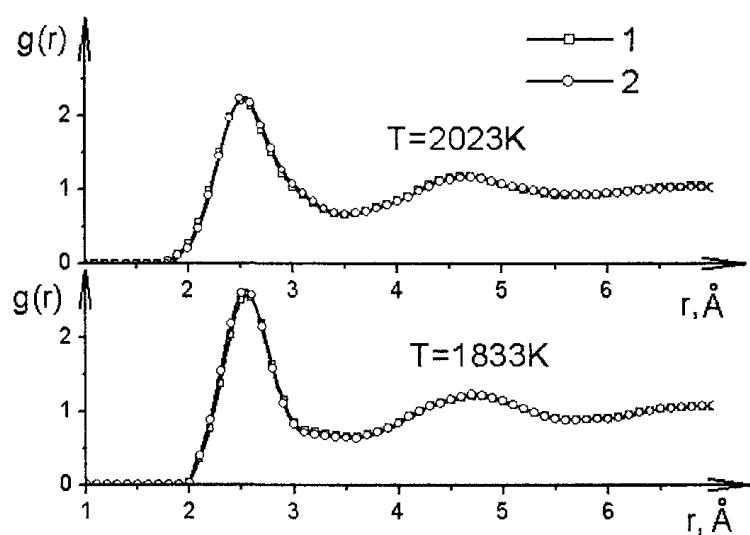


Рис. 1. Функции радиального распределения расплава железа при температурах 1833 и 2023 К: 1 – эксперимент, 2 – модель

Для анализа информации, заключенной в моделях использовался метод Вороного–Делоне [2]. В этом методе все пространство разбивается на фигуры простой формы: многогранники Вороного или симплексы Делоне. Разбиение пространства на многогранники Вороного или симплексы Делоне строится без использования трансляционной симметрии, что определило применение этого метода для изучения статистических закономерностей жидкостей и аморфных веществ.

Многогранник Вороного – область пространства, находящаяся ближе к одному из атомов, чем к остальным, является обобщением ячейки Вигнера–Зейца для неупорядоченных структур. Атомы, чьи МВ имеют общую грань,

естественно считать геометрическими соседями. Соединив центры атомов, являющихся геометрическими соседями, можно получить симплексы Делоне, показывающие сетку связей, т.е. направление и количество геометрических связей атома. Анализ разбиения Вороного или Делоне основан на изучении статистических закономерностей форм и размеров получающихся областей. Для многогранников изучаются распределения по объему, количеству граней, площади поверхности многогранника и коэффициенту сферичности (C). Коэффициент сферичности это нормированная мера [2], которая измеряется в пределах от 0 до 1, причем если он близок к 0, то фигура плоская, а если близок к 1, то фигура похожа на сферу.

Для симплексов Делоне используются меры [2] тетраэдричность (T), октаэдричность (O) – безразмерные величины, численно характеризующие близость симплекса к правильному тетраэдру, октаэдру. Эти меры построены таким образом, что для правильных фигур они обращаются в 0, симплексы с мерами далекими от 0 значительно искажены.

Симплексы Делоне имеют еще одно интересное свойство, он определяет не только связи атомов, но и положение сферических полостей между атомами. Можно показать [2], что 4 атома, касающиеся «пустой» сферы, образуют симплекс Делоне, и наоборот симплекс Делоне задает положение «пустой» сферы. Под «пустой» понимается сфера, не пересекающаяся с другими атомными сферами. Симплициальные полости несут информацию о взаимном расположении 4-х атомов, поэтому связаны не только с парными корреляциями расположения атомов. Система полостей, как показали недавние работы [3–5], помогает полнее раскрыть особенности атомной структуры модели. Симплициальные полости могут пересекаться, образуя пустоты сложной формы. Число пересечений симплициальной полости с соседними полостями не может превышать 4-х и численно характеризует рыхлость расположения 4-ки атомов симплекса [5]. Симплексы с числом пересечений 0, 1 и 2 являются частью плотной структуры (такие симплексы доминируют в кристаллах и плотноупакованных системах), симплексы с 3 и 4 пересечениями – фрагменты рыхлой структуры. Эти типы симплексов преобладают в простых жидкостях при окологритических температурах [5]. Симплексы с числом соседей 0...4 для краткости будем обозначать $n_0 \dots n_4$.

Результаты

В моделях расплава железа для температур 1833, 1873, 1923 и 2023 К были построены многогранники Вороного и симплексы Делоне. На рис. 2 и 3 представлены изменения параметров многогранников Вороного при повышении температуры расплава железа. Можно отметить постепенное увеличение среднего объема приходящегося на 1 атом и изменение коэффициента сферичности. Значительное изменение распределения многогранников по объему между температурами 1923 и 2023 К, и появление многогранников с малыми коэффициентами сферичности при этих же температурах говорит о том, что при этих температурах наблюдается ощутимое изменение геометрии взаимного расположения атомов.

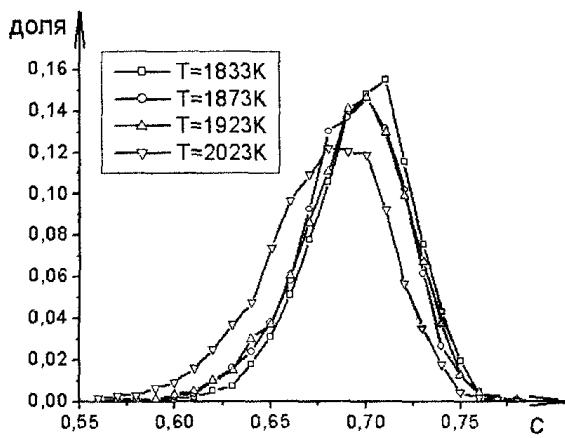


Рис. 2. Распределение многогранников Вороного по значению коэффициента сферичности в моделях расплава железа при различных температурах

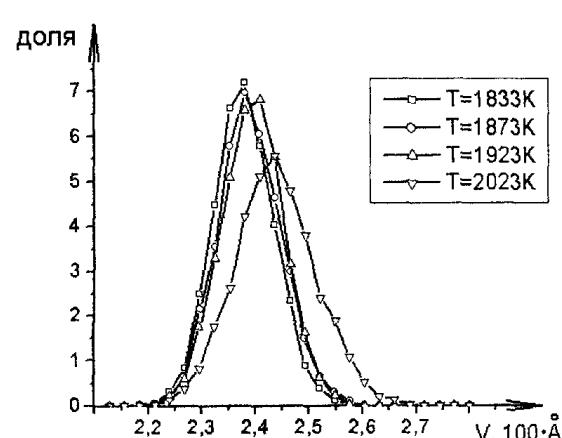


Рис. 3. Распределение многогранников Вороного по значению объема в моделях расплава железа при различных температурах

Распределение симплексов Делоне по значению мер T и O показаны на рис. 4, 5, вертикальными линиями показана условная граница правильных симплексов. Она определяется по сим-

плексам, присущим в немного деформированных плотноупакованных кристаллах [2]. По результатам представленным на графике можно отметить незначительные изменения в диапазоне температур 1833–1923 К и заметное снижение доли правильных тетраэдров в интервале температур 1923–2023 К. Зависимость октаэдричности от температуры менее наглядна, но на ней так же проявляются незначительные изменения при температурах 1833–1923 К, которые становятся более заметны при температурах 1923–2023 К.

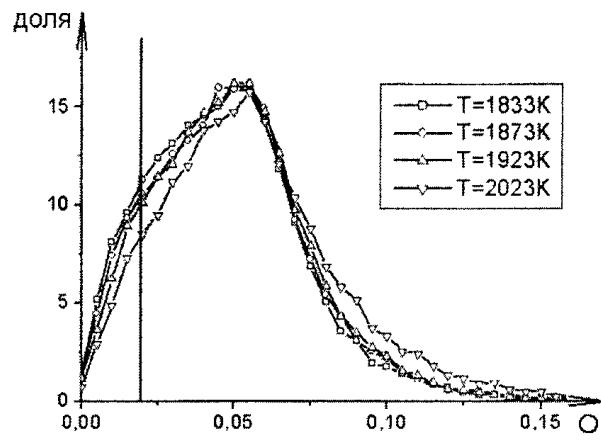


Рис. 4. Распределение симплексов Делоне по значению меры октаэдричности в моделях расплава железа при различных температурах

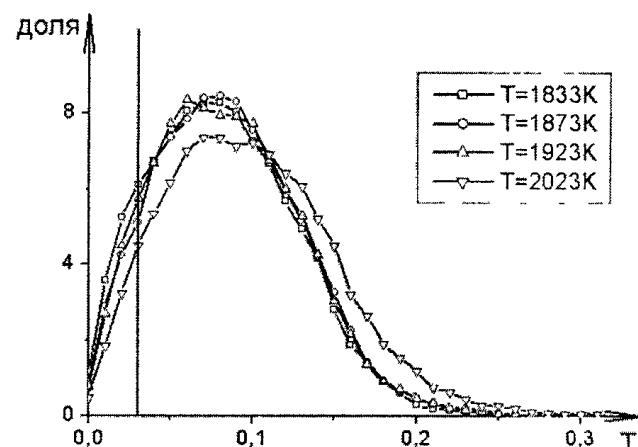


Рис. 5. Распределение симплексов Делоне по значению меры тетраэдричности в моделях расплава железа при различных температурах

Исследование числа соседей симплициальных полостей является наглядным способом оценить изменения пространственной геометрической структуры. Эти параметры не зависят от плотности системы, а характеризуют изменение взаимного расположения атомов [5]. Изменение доли симплициальных полостей с различным числом соседей представлено на рис. 6. Можно заключить, что расплав железа вблизи температуры плавления обладает плотной структурой, с доминирующим числом симплексов $n2$. Доля симплексов $n2$ составляет порядка 45 %, что свойственно структурам с плотной упаковкой (в идеальных кристаллах ГЦК и ГПУ доля симплексов $n2 = 66\%$). При повышении температуры доля симплексов $n2$, характерных для плотных структур падает до 40%, а доля симплексов $n3$ и $n4$, характерных для рыхлых структур, растет и достигает около температуры 2023 К 29 % и 19 % соответственно. Такое соотношение более характерно для идеальной случайной плотноупакованной [6] жидкости.

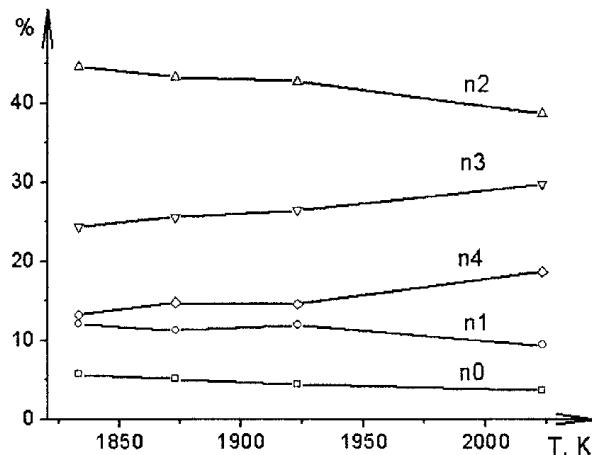


Рис. 6. Доля симплексов с различным числом соседей в моделях расплава железа при различных температурах

Заключение

В данной работе проанализированы модели расплава железа при нескольких температурах, от 1833 до 2023 К. Анализ атомной структуры методом Вороного–Делоне показал, что при температурах 1833–1923 К структура изменяется незначительно, в то время как в диапазоне температур 1923–2023 К происходят ощутимые изменения. Около температуры плавления велика доля плотноупакованных фрагментов, а при температуре 2023 К жидкое железо приближается к модели случайной плотноупакованной жидкости.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 03-03-32368-а, № 04-02-96013-p2004урал_а.

Литература

1. L. Reatto, D. Levesque and J.J. Weis Iterative Predictor-corrector method for extraction of the pair interaction from structural data for dense classical liquids // Phys. Rev. A. – 1986. – V. 33. – № 5. – P. 3451–3465.
2. Медведев Н.Н. Метод Вороного–Делоне в исследовании структуры некристаллических систем. – Новосибирск: Изд-во СО РАН. – 2000. – 214 с.
3. V.P. Voloshin, S. Beaufils and N.N. Medvedev Void space analysis of the structure of liquids // Journal of molecular liquids. – 2002. – V. 96–97. – P.101–112.
4. Воронцов А.Г., Мирзоев А.А., Гельчинский Б.Р. Анализ межатомного пространства в жидким цезии // ЖФХ. – 2003. – Т. 77. – № 11. – С. 1800–1804.
5. Воронцов А.Г., Гельчинский Б.Р. Статистико-геометрическое исследование структуры расплавов цезия и ртути // Труды XI Российской конференции «Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов». – Т. 1. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2004. – С. 204–208.
6. Займан Дж. Модели беспорядка. – М.: Мир, 1982. – 592 с.

Поступила в редакцию 3 марта 2005 г.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ВЯЗКОПЛАСТИЧНОЙ СРЕДЫ В ЦИЛИНДРЕ, СОВЕРШАЮЩЕМ ЗАТУХАЮЩИЕ КРУТИЛЬНЫЕ КОЛЕБАНИЯ

Г.П. Вяткин, И.В. Елюхина

Проведен обзор и анализ возможностей существующих методик для моделирования и наблюдения вязкопластичного поведения среды, заполняющей совершающий крутильные колебания цилиндр. Изучены особенности течения идеальных сред, а также методология их численного моделирования. В рамках измеряемых в эксперименте параметров колебаний продемонстрирована степень соответствия приближенных моделей идеальной бингамовской жидкости.

Введение. Ранее были изучены возможности крутильно-колебательного метода по наблюдению и измерению неильтоновских, в т.ч. вязкопластичных (бингамовских), свойств [1]. В работе ставилась задача идентификации реологического типа среды – выявления эффектов (прежде всего, качественных), присущих именно бингамовским средам и связанных с появлением пластической составляющей в уравнении состояния. Поэтому интерес представляла идеальная вязкопластичная среда и, в частности, псевдопластичное (нелинейно вязкое) состояние не рассматривалось. В реальности среды, свойства которых обычно исследуются такими вискозиметрическими методами, скорее «жидко-», а не «вердоподобны», т.е. хоть и слабо, но текут при любой не равной нулю скорости сдвига. В связи с этим интересным представляется рассмотрение иных возможных моделей вязкопластичного поведения с различными значениями модельных коэффициентов, отражающих различную степень неильтоновости свойств.

Математическая формулировка задачи. Кратко напомним основные условия движения [1]. Пусть пустой цилиндр подвешен вдоль своей оси на упругой нити и совершает вокруг нее крутильные колебания с периодом τ_0 и декрементом затухания δ_0 . При заполнении его вязкопластичной средой изосинхронный режим колебаний в общем случае нарушается, и колебательный процесс можно охарактеризовать параметрами $\tau = 2\Delta T_\tau$ и $\delta = 2\ln|\alpha_1/\alpha_2|$, где ΔT_τ – разница между двумя соседними моментами времени, когда угловое смещение цилиндра α обращается в нуль; α_1, α_2 – соседние экстремальные значения α ($|\alpha_1| > |\alpha_2|$). Период $\tau > \tau_0$ вследствие того, что при увлечении жидкости стенками цилиндра возрастает эффективный момент инерции подвесной системы; $\delta > \delta_0$ в связи с дополнительной диссипацией механической энергии, обусловленной вязким трением в жидкости.

Математическую модель движения сосуда, непосредственно связанного с возбуждаемым им движением среды, для случая длинного цилиндра и прочих традиционных для метода допущений представим в виде

– уравнение движения жидкости

$$\frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial \sigma_{\xi\varphi}}{\partial \xi} + \frac{2\sigma_{\xi\varphi}}{\xi}; \quad (1)$$

– уравнение движения цилиндра

$$\frac{d^2\alpha}{dT^2} + \frac{\delta_0}{\pi} \frac{d\alpha}{dT} + \alpha = P; \quad (2)$$

– начально-краевые условия для (1), (2):

$$U(\xi, 0) = 0, \quad U(\xi_0, T) = \frac{d\alpha}{dT} \xi_0, \quad U(0, T) = 0, \quad \alpha(0) = \alpha_0 \sim 6^\circ, \quad \left. \frac{d\alpha}{dT} \right|_{T=0} = 0; \quad (3)$$

– реологическое уравнение состояния вязкопластичной среды (модель Бингама – см. [2, 3, 4] и пр.)

$$\sigma_{\xi\varphi} = \begin{cases} \left(1 + \frac{Bm}{D}\right) D_{\xi\varphi} & \text{при } \sigma \geq Bm, \\ D_{\xi\varphi} = 0 & \text{при } \sigma < Bm; \end{cases} \quad (4)$$

где

$$P = -\frac{4}{\xi_0^2} A \sigma_{\xi\varphi} \Big|_{\xi=\xi_0}, \quad D_{\xi\varphi} = \frac{\partial U}{\partial \xi} - \frac{U}{\xi}, \quad A = \frac{MR^2}{2K}, \quad Bm = \frac{S_0}{\nu \rho q_0},$$

$$U = V/dq_0, \quad T = q_0 t, \quad \xi_0 = R/d, \quad \xi = r/d, \quad d = \sqrt{v/q_0}, \quad q_0 = 2\pi/\tau_0; \quad (5)$$

A – отношение момента инерции жидкости в вискозиметре ($MR^2/2$) и пустой подвесной системы (K); Bm – число Бингама; d – толщина пограничного слоя; D – безразмерный второй инвариант тензора скоростей деформации, для рассматриваемых условий течения $D = |D_{\xi\varphi}|$;

$D_{\xi\varphi}$ – безразмерная $\xi\varphi$ -ая компонента тензора скоростей деформации; M – масса среды; P – момент сил, приложенных к цилиндру со стороны среды; q_0 – циклическая частота колебаний пустого цилиндра; R – внутренний радиус цилиндра; r – радиальная координата ($r = 0$ на оси цилиндра); t – время; V – азимутальная компонента скорости; α_0 – начальное угловое смещение цилиндра; φ – угловая координата; ν , ρ , S_0 – кинематическая вязкость, плотность и предел текучести среды соответственно; σ – безразмерный второй инвариант тензора напряжений; $\sigma_{\xi\varphi}$ – безразмерная $\xi\varphi$ -я компонента тензора напряжений; задача (1)–(4) решается численно.

Результаты и обсуждение. I. Идеальная вязкопластичная среда. Особенности течения жидкости и крутильных колебаний цилиндра. Прежде всего, остановимся на качественных особенностях движения цилиндра (см. также и в [1]), совершающего затухающие крутильные колебания, и заполняющей его идеальной вязкопластичной среды, а также выполним экскурс в способы моделирования такого движения, т.к. эти вопросы необходимы для дальнейшего понимания отклика параметров колебаний на течение не идеальной среды в сосуде.

При заполнении вискозиметра вязкопластичной средой около оси цилиндра всегда присутствует твердое ядро, где сдвиговые напряжения не превосходят предела текучести. В потоке также имеется тонкий твердотельный слой, возникающий у поверхности цилиндра, перемещающийся затем к ядру, граница которого движется в это время от центра, и при достижении ядра сливающийся с ним; в следующую четверть периода происходит обратное движение; далее в новом полупериоде при $\xi = \xi_0$ вновь образуется такой слой (в общем случае их может быть несколько) и т.д. Зависимость, к примеру, радиуса ядра ξ' от времени является периодической функцией; колебания $\xi' = \xi'(T)$ обычно нарастающие, а кривая, отражающая среднее значение, является вогнутой возрастающей функцией. Эти колебания не гармонические, даже если не учитывать резкий скачок ξ' при слиянии ядра и слоя, а спектр $\xi' = \xi'(T)$ в целом аналогичен таковому для $\alpha = \alpha(T)$ (основная частота $\xi' = \xi'(T)$ равна $4\pi/\tau^1$, где τ^1 – соответствует гармонике с наибольшей интенсивностью на спектре $\alpha = \alpha(T)$). В застойных, или твердотельных, зонах скорость U по координате ξ изменяется линейно: $dU/d\xi - U/\xi = 0$, и, в частности, в случае, когда твердое ядро заполняет весь объем вискозиметра, $U(\xi, T) = d\alpha/dT \cdot \xi$. Таким зонам соответствуют прямолинейные участки, начиная от $\xi = 0$, на профилях скорости сдвига и скорости среды, а также участки с искривлением профиля скорости сдвига при смене знака D .

С ростом номера колебания N в процессе затухания область «твердотельного» течения расстет, и при $N \geq N_{mb}$ твердое ядро заполняет весь объем вискозиметра. В этом случае эффективный момент инерции системы достигает своей наибольшего значения ($MR^2/2 + K$), а вместе с ним наибольшим становится и период, прямо пропорциональный корню квадратному из этой величины. Значение δ тогда минимально и совпадает с δ_0 ввиду отсутствия диссипации меха-

нической энергии вследствие вязкого трения. Зависимость безразмерной частоты колебаний заполненного жидкостью цилиндра $\lambda = \tau / \tau_0$ от N является монотонно возрастающей и тем быстрее достигает значения λ_{mb} (при $N \geq N_{mb}$ режим колебаний так же изосинхронный, как и для ньютоновской среды), чем больше Bm . Зависимость $\delta = \delta(N)$ сначала растет до некоторого значения δ_m , одинакового для всех чисел Bm при прочих равных условиях, а затем сравнительно быстро падает до $\delta \sim \delta_0$. При увеличении числа Bm кривая $\delta = \delta(N)$ смещается к оси ординат и становится монотонно убывающей. В подобной ситуации наблюдаемые в эксперименте эффекты, связанные с вязкопластическим поведением среды, обусловлены, прежде всего, не гармоническим законом колебаний даже в отсутствии переходных процессов. Поэтому для большей наблюдаемости таких эффектов должна быть большей разница между значениями частоты $\lambda_1 = \lambda|_{N=1}$ и декремента $\delta_1 = \delta|_{N=1}$ в начале колебательного процесса и значениями λ_{mb} и δ_m , δ_0 соответственно. К тому же, желательно, чтобы колебания затухали дольше, чем достигались значения δ_0 и λ_{mb} , число N было достаточным, но в то же время чувствительности $\partial\lambda/\partial Bm$ и $\partial\delta/\partial Bm$ (а также и $\partial\lambda/\partial N$, $\partial\delta/\partial N$) имели высокие значения. Выбор оптимальных условий эксперимента можно выполнить аналогично приведенному, например, в [5].

Способы численного моделирования. Расчет по идеальной модели для вязкопластичной среды, так же как и учет конечной длины цилиндра, значительно усложняет численные формулировки и в общем случае не позволяет обеспечить требуемую точность и в ряде случаев сходимость к истинному устойчивому решению при заданных требованиях к эксперименту. Так, в частности, численные модели, основанные на определении на каждом временном слое радиуса твердого ядра вязкопластического течения аналогично выполняемому при стационарных течениях, к примеру, в капиллярной геометрии, не позволяют корректно промоделировать твердотельные прослойки, наличие которых изменяет напряжение на стенке цилиндра, внося зачастую существенные ошибки в закон колебаний. К тому же, при определенных условиях эксперимента и само определение радиуса ядра ξ' вызывает значительные трудности ввиду неоднократной смены знака в распределении скорости сдвига вдоль радиуса цилиндра. Заметим также, что наличие слагаемых в системе уравнений цилиндра и среды, связанных с торцевыми эффектами (необходимых в случае не ‘длинного’ цилиндра), делает овраг функции качества, являющейся критерием соответствия расчетных и экспериментальных данных, на плоскости (ν, σ_0) еще более пологим и практически невозможным корректную оценку свойств среды при реализуемой на практике точности измеряемых параметров (подробнее о построении функции качества, планировании оптимального эксперимента и пр. – см., к примеру, [5]).

В связи с вышесказанным для описания идеального бингамовского поведения в качестве основной рабочей модели была выбрана модель bi-viscosity (см, например, [6, 7, 8]), обеспечивающая при решении этой внутренней гидродинамической задачи хорошую сходимость с идеальной вязкопластичной жидкостью. Напомним, что в модели движение нетекущей компоненты рассматривается как движение ньютоновской среды, вязкость которой намного превосходит вязкость текучей компоненты:

$$\sigma_{\xi\varphi} = \begin{cases} \left(1 + Bm/D\right) D_{\xi\varphi} & \text{при } D \geq D_0, \\ k_\sigma D_{\xi\varphi} & \text{при } D < D_0; \end{cases} \quad (6)$$

где $D_0 = Bm/(k_\sigma - 1)$ – значение D , соответствующее переходу среды между нетекучим состоянием и вязкопластическим течением; k_σ – модельный коэффициент; здесь пластическая вязкость равна 1, а ньютоновская – k_σ . В обсуждаемой задаче для лучшего соответствия модели (6) идеальному вязкопластичному поведению значение k_σ принималось достаточно высоким $\sim 10^3$ (обычно $k_\sigma \sim 10^2$). Такое приближение дает удовлетворительные результаты: при $k_\sigma \sim 10^3 \dots k_\sigma \sim 10^4$ расхождение в рассчитанных значениях параметров колебаний составляло даже в наихудшем случае менее 0,1 %.

II. Неидеальная вязкопластичная среда. Модели вязкопластичного поведения. При моделировании не идеального бингамовского поведения рассмотрим все возможные варианты:

- 1) модель bi-viscosity (6) с различными значениями модельного коэффициента k_σ ;
- 2) экспоненциальную зависимость эффективной вязкости от модуля скорости сдвига, предложенную в [9], и также, как и bi-viscosity, широко используемую на практике (см., например, [10, 11] и пр.)

$$\sigma_{\xi\varphi} = \left\{ 1 + \frac{Bm}{D} [1 - \exp(-mD)] \right\} D_{\xi\varphi}; \quad (7)$$

где m – параметр, контролирующий экспоненциальный рост напряжения, который обычно в расчетах при моделировании бингамовского поведения принимается $\sim 10^2$;

- 3) реологическое уравнение состояния нелинейно вязкой среды с показателем степенного реологического закона $n < 1$ (модель Оствальда – Вейля – см., например, [12])

$$\sigma_{\xi\varphi} = b D^{n-1} D_{\xi\varphi}; \quad (8)$$

где $b = q_0^{n-1} k / \nu \rho$, k – постоянная степенного реологического закона.

Для описания нелинейностей, возникающих на экспериментальных кривых течения бингамовских сред в диапазоне малых скоростей сдвига, используются модели нелинейного вязкопластичного поведения: Кессона, Балкли–Гершеля и пр., а также модель Шульмана, сочетающая в разных нелинейных мерах пластичность и нелинейную вязкость и обобщающую большинство известных моделей. Особенности колебательных процессов при заполнении вискозиметра такими средами (на примере реологической модели Балкли–Гершеля) были изучены в [1].

Далее примем следующие условия эксперимента: $\zeta_0 = 10$, $A = 0,1$, $\delta_0 \leq 0,001$, и будем моделировать течение среды с числом Бингама $Bm = 0,5$. Для наглядности реологических схем расчета приведем также кривую течения – зависимость напряжения от модуля скорости сдвига (см. рис. 1), показывающую как приближает та или иная модель поведение реальной среды к идеальному вязкопластичному в диапазоне D , реализуемом в вискозиметре. Параметры моделей (6)–(8), принятые для расчетов, следующие:

- модель (6) (пунктирные линии на рис. 1 и далее): 1 – $k_r = 10$, 2 – $k_r = 100$;
- модель (7) (штрихпунктирные линии): 1 – $m = 10$, 2 – $m = 100$;
- модель (8) (сплошные линии): 1 – $b = 0,75$ и $n = 0,9$, 2 – $b = 1,25$ и $n = 0,7$.

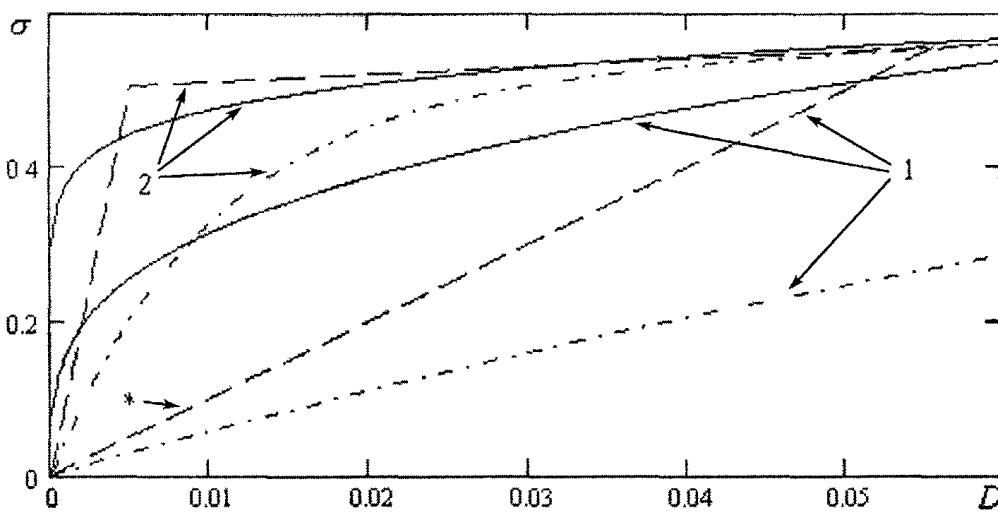


Рис. 1. Кривые течения неидеальных вязкопластичных сред

Изменение параметров колебаний при движении цилиндра. Зависимость параметров колебаний от их номера для сред со сложными реологическими свойствами продемонстрирована на рис. 2. В случае идеального вязкопластичного материала после установления ‘твердотельного’ режима течения (когда $N \geq N_{me}$) значения $\delta \sim \delta_0$ и $\lambda \sim \lambda_{me} = (1 + A)^{1/2}$ (повторим, что результаты расчетов по идеальной среде получены в рамках модели bi-viscosity с коэффициентом $k_\sigma \sim 10^3$

и приведены в [1]). В остальных расчетных ситуациях при $N \geq N_{mb}$ еще присутствует диссипация вследствие вязкого трения, и $\delta > \delta_0$; а $\lambda < \lambda_{mb}$, т.к. не вся жидкость внутри цилиндра выполняет роль «присоединенной» массы. Из рис. 2 можно увидеть какой степенью неньютоновости обладают среды с рассматриваемыми реологическими уравнениями состояния согласно этой особенности. Значения параметров колебаний при аналогичных условиях эксперимента для ньютоновской среды $\lambda_{ニュート} \sim 1,014$ и $\delta_{ニュート} \sim 0,069$, а $\lambda_{mb} \sim 1,049$. Наилучшее приближение к идеальной бингамовской среде из представленных на рис. 1 вариантов обеспечивает модель bi-viscosity с $k_\sigma = 100$, что согласуется результатами, касающимися изменения параметров колебаний во времени (рис. 2а, б).

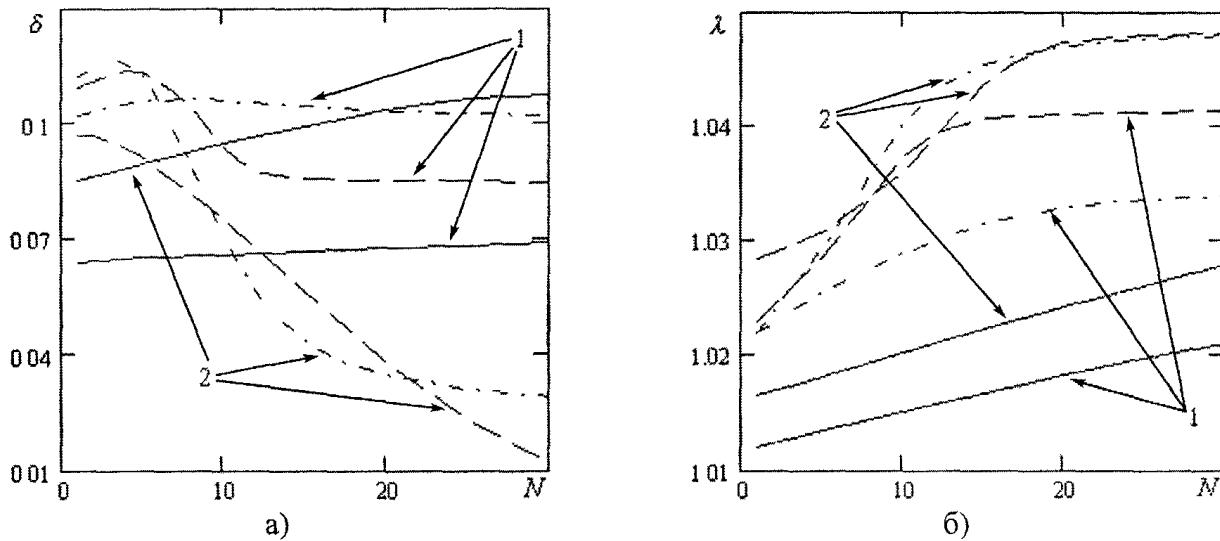


Рис. 2. Зависимость параметров колебаний от их номера

На зависимостях $\delta = \delta(N)$ и $\lambda = \lambda(N)$ (рис. 2а, б) имеются участки, где $\delta, \lambda \sim \text{const}$. Они, например, в модели bi-viscosity, отвечают вискозиметру, полностью заполненному истекущей средой. В терминах модели (6) при низких значениях k_σ это участки, которым соответствует течение ньютоновской среды с вязкостью, равной k_σ . Так, при вязкости, равной $k_\sigma = 10$ (вместо 1) параметры колебаний при расчете по зависимости для ньютоновской среды $\lambda \sim 1,041$ и $\delta \sim 0,0856$ (соответствуют прямой течения (прямой), обозначенной знаком *, на рис. 1). При вязкости, равной 100, значения $\lambda \sim 1,0486$ и $\delta \sim 0,0113$, что отвечает величинам, указанным на рис. 2 а, б. Выход на режим с $\delta(N), \lambda(N) \sim \text{const}$ в случае проведенного расчета происходит быстрее при более низком k_σ . Это можно объяснить тем обстоятельством, что при меньшем k_σ интервал значений D , при которых вязкость постоянна, шире и к тому же в этом случае декремент затухания выше, что обеспечивает более быстрый выход при меньшем N . Участки $\delta, \lambda \sim \text{const}$ горизонтальны (к примеру, при $k_\sigma = 10$), т.е. как и в случае колебаний идеальной среды при $N \geq N_{mb}$, но значения δ_0 и λ_{mb} в этом случае не достигаются, т.к. такой вариант является слабым приближением идеальной бингамовской жидкости. Смещение кривых $\delta = \delta(N)$ и $\lambda = \lambda(N)$ с изменением модельного коэффициента в некотором смысле аналогично реализуемому при изменении числа Bm и прочих равных условиях для идеальных сред, т.е. чем сильнее влияние пластичности, тем больше смещается к оси ординат, а затем и вовсе исчезает, максимум функции $\delta = \delta(N)$; для сред с большими модельными коэффициентами значения λ_1 и $d\lambda/dBm$ выше и пр. Так, к примеру, с ростом k_σ (при $k_\sigma \sim 10^2$ и выше) происходит подобное смещение указанных кривых, и выход на режим с постоянными значениями частоты и декремента затухания обычно происходит быстрее.

При увеличении чисел Бингама при некотором $Bm = Bm'$ напряжение в среде становится недостаточным для сдвига, обеспечивающего возникновение текучей фазы, и с самого начала коле-

бательных процессов вискозиметр полностью заполнен твердой зоной. При таком сдвиге, хотя и малом даже для $N = 1$ (с ростом N при одном и том же режиме течения амплитуда $D = D(T)$ становится меньше), ввиду перестройки напряжений в потоке возможно существование течения и при $N > 1$. При малых Bm с ростом этого числа кривые $\delta = \delta(N)$ и $\lambda = \lambda(N)$ смещаются последовательно, а при Bm' происходит скачок и далее при всех Bm параметры колебаний для идеальной вязкопластичной среды $\delta \sim \delta_0$ и $\lambda \sim \lambda_{\text{max}}$. При уменьшении Bm значения λ_1 и δ_1 приближаются к λ_{new}^* и δ_{new}^* , а при $Bm < \sim 0,01$ они практически им равны (по рис. 2 можно проследить, как влияет наличие пластичных свойств на λ_1 , δ_1). Зависимости параметров колебаний от их номера в этом случае также аналогичны приведенному на рис. 2 а, б: декремент сначала растет, а потом падает; период растет монотонно, начиная от λ_{new}^* , и в процессе затухания колебаний реализуется больший интервал значений λ и δ .

Для ньютоновских сред (рис. 3 в [13]) величина λ уменьшается с ростом ξ_0 в основном на интервале $\xi_0 \in (2 \dots 12)$, а поведение δ зависит от величины ξ_0 : при $\xi_0 > \xi_{0\delta}$ с ростом ξ_0 декремент уменьшается, а при $\xi_0 < \xi_{0\delta}$ – растет, где $\xi_{0\delta} \sim 4,2$. Эти закономерности подтверждаются и в случае вязкопластичных сред. Так, представим последние средами с очень высокой вязкостью (в k_σ раз выше, чем у ньютоновской – см. (6)) и в качестве ξ_0 рассмотрим величину $\xi_{0bi} = \xi_0 / \sqrt{\tilde{k}_\sigma}$, где \tilde{k}_σ – усредненная по полупериоду кажущаяся вязкость. В процессе колебаний \tilde{k}_σ растет, и значение ξ_{0bi} уменьшается. Значение $\xi_{0bi\delta} \sim 4,2$, и, к примеру, соответствует экстремуму $\delta = \delta(N)$ на рис. 2а. Заметим, что если с самого начала колебательных процессов реализуется значение $\xi_{0bi\delta} < 4,2$, то зависимость $\delta = \delta(N)$ – монотонно убывающая.

Поясним эту качественную картину с иной стороны. Рассмотрим бингамовскую среду как псевдопластичную с реологическими свойствами, соответствующими (8). Тогда $\xi_{0nv} = \xi_0 / \sqrt{b\tilde{D}^{n-1}}$, где \tilde{D} – усредненное по полупериоду значение D при $\xi = \xi_0$. С ростом N амплитудное значение скорости сдвига уменьшается, и кажущаяся вязкость $b\tilde{D}^{n-1}$ растет, а значение ξ_{0nv} падает. Для ньютоновских сред при значениях $\xi_0 \rightarrow 0$ с уменьшением ξ_0 период растет слабо, а декремент при $\delta_0 \sim 0$ устремляется к нулю [13]. Также и для нелинейно вязких (псевдопластичных) сред в результате колебаний происходит выход на асимптотический режим, характеризуемый мало изменяющимися во времени значениями λ_{ac} . При уменьшении ξ_0 в интервале $\xi_0 \in (3 \dots 1)$ происходит сильное падение δ , что соответствует участку кривой $\delta = \delta(N)$ после максимума; при $\xi_0 \rightarrow 0$ значения декремента δ_{ac} соответствуют параметрам колебаний сильно вязкой среды.

Некоторые особенности течения вязкопластичных сред в цилиндре. С помощью реологической модели нелинейно вязкой среды можно наглядно объяснить распределение скорости течения вдоль радиуса цилиндра. Для таких сред можно выделить два вида течения: при вязкости больше и меньше ньютоновской, в зависимости от чего граница области развитого течения приближается или удаляется от цилиндра по сравнению с ньютоновской. При $n < 1$ кривые течения имеют выпуклость вверх, к оси напряжений (рис. 1), при $n > 1$ – вниз, а для ньютоновской среды, при $n = 1$, это прямые. Вязкость (кажущаяся, определяемая отношением напряжения и скорости сдвига) при малых скоростях сдвига в случае $n < 1$ имеет значение выше, чем для среды с $n = 1$, до точки пересечения кривой, ей соответствующей, с прямой, отвечающей $n = 1$, а с ростом D становится ниже. Глубина проникновения пропорциональна кажущейся вязкости bD^{n-1} , которая для псевдопластичных сред при данных условиях эксперимента (когда $D < 1$) падает с ростом n и D . Это означает, что для дилатантных сред ($n > 1$) область развитого течения находится вблизи стенки цилиндра и при численном моделировании расчеты необходимо проводить в интервале $\xi \in [\xi_1, \xi_0]$, где ξ_1 определяется как $U(0 \dots \xi_1, T) \sim 0$, а для псевдопластичных – в ряде

случаев брать большее число точек у оси цилиндра. Для бингамовской жидкости (как и для псевдопластичной) также характерен рост области развитого течения по сравнению с ньютоновской, что хорошо можно наблюдать, к примеру, при колебаниях тела в безграничной среде. Это обусловлено, прежде всего, увлечением жидкости твердыми прослойками. Заметим, что если напряжение сдвига между «твердотельным» слоем и ядром недостаточно для возникновения течения в этой области, то при N , близком к N_{mb} , «твердотельная» фаза может быть представлена только ядром (с присоединенным к нему слоем).

Заключение. Итак, в настоящей работе обсуждены особенности приложения, в т.ч. численного моделирования, существующих вариантов описания вязкопластичного идеального и не идеального поведения жидкости применительно к среде, заполняющей совершающий затухающие крутильные колебания цилиндр, а именно: моделей Бингама, bi-viscosity, Папанастасио и Оствальда – Вейля. В терминах измеряемых в эксперименте параметров продемонстрирована наблюдаемость неニュтоновских свойств (для ньютоновских сред в отсутствии переходных процессов параметры колебаний не изменяются во времени), а также показано, насколько существующие модели могут служить приближением для идеального бингамовского поведения.

Литература

1. Елюхина И.В., Вяткин Г.П., Бескачко В.П. Новые возможности крутильно-колебательного метода Швидковского Е.Г.: идентификация реологической принадлежности среды// Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2003. – Вып. 3. – № 6(22). – С. 108–115.
2. Bird R.B., Dai G.C., Yarusso B.J. The rheology and flow of viscoplastic materials // Rev. in Chem. Eng. – 1983. – № 1. – P. 1–70.
3. Barnes H.A. The yield stress – a review or «panta roi» – everything flows?// J. Non-Newtonian Fluid Mech. – 1999. – № 81. – P. 133–178.
4. Shelukhin V.V. Bingham viscoplastic as a limit of non-newtonian fluids// J. Math. Fluid Mech. – 2002. – № 4. – P. 109–127.
5. Вяткин Г.П., Елюхина И.В. Разработка методов параметрической идентификации сред Оствальда–Вейля по результатам вибрационной реометрии// Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2004. – Вып. 4. – № 8(37). – С. 22–27.
6. Keentok M., Milthorpe J.F., O'Donovan E. On the shearing zone around rotating vanes in plastic liquids: theory and experiment // J. Non-Newtonian Fluid Mech. – 1985. – № 17. – P.23–35.
7. Alkhatib M.A.M, Wilson S.D.R The development of Poiseuille flow of a yield-stress fluid // J. Non-Newtonian Fluid. Mech. – 2001. – № 100. – P. 1–8.
8. Beverly C.R., Tanner R.I. Numerical analysis of three-dimensional Bingham plastic flow // J. Non-Newtonian Fluid Mech. – 1992. – V. 42. – P. 85–115.
9. Papanastasiou T.C. Flows of materials with yield // J. Rheol. – 1987. – № 31. – P. 385–404.
10. Smyrnaios D.N., Tsamopoulos J.A. Squeeze flow of Bingham plastics// J. Non-Newtonian Fluid Mech. – 2001. – № 100. – P. 165–190.
11. Blackery J., Mitsoulis E. Creeping motion of a sphere in tubes filled with a Bingham plastic material // J. Non-Newtonian Fluid Mech. – 1997. – № 70. – P. 59–77.
12. Fang P., Manglik R.M., Jog M.A. Characteristics of laminar viscous shear-thinning fluid flows in eccentric annular channels // J. Non-Newt. Fluid Mech. – 1999. – № 84. – P. 1–17.
13. Швидковский Е.Г. Некоторые вопросы вязкости расплавленных металлов. – М.: ГИТТЛ, 1955. – 206 с.

Поступила в редакцию 26 января 2005 г.

ОБ ОДНОМ СПОСОБЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СКОРОСТИ ВОЛНЫ РЭЛЕЯ***А.В. Геренштейн, Х.Б. Толипов***

Для классической задачи Рэлея предложен иной подход к определению скорости поверхности волны.

В работе [1] было получено решение задачи об установившихся колебаниях упругого полупространства, которое получило название поверхности волны (или волны Рэлея).

Во всех обзорах и учебниках, где это решение излагается, скорость волны Рэлея определялась после получения явного решения. Однако для других областей (например, клина) получение решения в конечном виде весьма проблематично. Но так как исходные уравнения – линейные, с постоянными коэффициентами, то для определенных областей с помощью преобразования Лапласа можно перейти к уравнениям в изображениях и попытаться найти скорость интересующей нас волны (если скорости нет, то и волны нет). Это авторы и попытались сделать на примере классической задачи Рэлея.

Рассмотрим в плоской постановке задачу колебаний полупространства ($x > 0$), граница которого свободна от напряжений. Отыскиваем решения, не зависящие от переменной z и затухающие при $x \rightarrow \infty$.

Уравнения для смещений имеют вид:

$$\begin{aligned} \rho U_{tt} &= (\lambda + \mu)(U_{xx} + V_{xy}) + \mu(U_{xx} + U_{yy}), \\ \rho V_{tt} &= (\lambda + \mu)(U_{xy} + V_{yy}) + \mu(V_{xx} + V_{yy}), \end{aligned} \quad (1)$$

где U и V – смещения, соответственно, вдоль осей x , y .

Краевые условия на поверхности ($x = 0$) имеют вид:

$$\begin{aligned} \sigma_{zz} &= \lambda(U_x + V_y) + 2\mu U_x = 0, \\ \sigma_{xy} &= \mu(U_y + V_x), \end{aligned} \quad (2)$$

Предварительно сделаем замену, введя новые искомые функции:

$$U = \varphi_x + \psi_y, \quad V = \varphi_y - \psi_x, \quad (3)$$

В этом случае уравнения (1) примут вид:

$$\begin{aligned} \rho \varphi_{tt} &= (\lambda + 2\mu)(\varphi_{xx} + \varphi_{yy}), \\ \rho \psi_{tt} &= \mu(\psi_{xx} + \psi_{yy}). \end{aligned} \quad (4)$$

Краевые условия (2) при $x = 0$ принимают вид:

$$(\lambda + 2\mu)\varphi_{xx} + \lambda\varphi_{yy} - 2\mu\psi_{xy} = 0.$$

$$2\varphi_{xy} - \psi_{xx} + \psi_{yy} = 0.$$

Из уравнений (4) найдем φ_{zz} и ψ_{zz} и подставим в краевые условия. В итоге получим:

$$\begin{aligned}\frac{\rho}{2\mu}\varphi_{tt} - \varphi_{yy} + \psi_y &= 0, \\ \frac{\rho}{2\mu}\psi_{tt} - \psi_{yy} + \varphi_{xy} &= 0.\end{aligned}\tag{5}$$

Удобно изменить масштаб времени и координат (обезразмерив их)

$$k t \sqrt{\frac{\mu}{\rho}} \mapsto t, \quad kx \mapsto x, \quad ky \mapsto y$$

(k – волновое число) и обозначить:

$$\frac{\lambda + 2\mu}{\mu} = c^2, \quad (c^2 > 2).$$

В итоге уравнения примут вид:

$$\begin{aligned}\varphi_{tt} &= c^2 (\varphi_{xx} + \varphi_{yy}), \\ \psi_{tt} &= \psi_{xx} + \psi_{yy}.\end{aligned}\tag{6}$$

Границные условия примут вид

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\varphi_{tt} - \varphi_{yy} + \psi_{xy} &= 0, \\ \frac{1}{2}\psi_{tt} - \psi_{yy} + \varphi_{xy} &= 0.\end{aligned}\tag{7}$$

Отыскивается решение вида:

$$\varphi = \varphi(x) \exp i(y - \omega t), \quad \psi = i\psi(x) \exp(y - \omega t),\tag{8}$$

Если v – скорость волны Рэлея, то $\omega = v \sqrt{\rho/\mu}$. Этую величину и надо определить.

После преобразований уравнения примут вид:

$$\begin{aligned}\varphi_{xx} + \frac{\omega^2 - c^2}{c^2} \varphi &= 0, \\ \psi_{xx} + (\omega^2 - 1)\psi &= 0,\end{aligned}\tag{9}$$

Конечно, система (9) легко решается, но наша задача – определить ω , не получая явного решения.

Краевые условия примут вид:

$$\begin{aligned}\left(1 - \frac{\omega^2}{2}\right)\varphi(0) - \psi_x(0) &= 0, \\ \left(1 - \frac{\omega^2}{2}\right)\psi(0) + \varphi_x(0) &= 0.\end{aligned}\tag{10}$$

Применим преобразование Лапласа:

$$\bar{\varphi}(p) = \int_0^\infty e^{-px} \varphi(x) dx, \quad \bar{\psi}(p) = \int_0^\infty e^{-px} \psi(x) dx.$$

Напомним, что при этом

$$\varphi(x) \leftrightarrow \bar{\varphi}(p), \quad \varphi_x(x) \leftrightarrow p \bar{\varphi}(p) - \varphi(0), \quad \varphi_x(x) \leftrightarrow p^2 \bar{\varphi}(p) - p\varphi(0) - \varphi_x(0),$$

$$\psi(x) \leftrightarrow \bar{\psi}(p), \quad \psi_x(x) \leftrightarrow p \bar{\psi}(p) - \psi(0), \quad \psi_x(x) \leftrightarrow p^2 \bar{\psi}(p) - p\psi(0) - \psi_x(0).$$

Получим уравнения в изображениях:

$$\begin{aligned} \left(p^2 + \frac{\omega^2 - c^2}{c^2} \right) \bar{\varphi}(p) &= p\varphi(0) + \varphi_x(0), \\ (p^2 + \omega^2 - 1) \bar{\psi}(p) &= p\psi(0) + \psi_x(0). \end{aligned}$$

$\varphi_x(0)$ и $\psi_x(0)$ выразим из краевых условий (10) через $\varphi(0)$ и $\psi(0)$ и получим решение в изображениях:

$$\bar{\varphi}(p) = \frac{p\varphi(0) + (0,5\omega^2 - 1)\varphi(0)}{p^2 + \frac{\omega^2 - c^2}{c^2}}, \quad (11)$$

$$\bar{\psi}(p) = \frac{p\psi(0) + (0,5\omega^2 - 1)\psi(0)}{(p^2 + \omega^2 - 1)}. \quad (12)$$

Если $\omega^2 \geq 1$, то в формуле (12) полюса чисто мнимые. При этом оригинал будет иметь слагаемые типа синуса и косинуса, т.е. решения не затухают на бесконечности.

Поэтому должно быть $\omega^2 < 1$.

Тогда в каждом из выражений (11), (12) один из полюсов будет положительный, другой отрицательный

Необходимо, чтобы вычеты в положительных полюсах были нулевыми (иначе получим экспоненциальный рост на бесконечности). При этом $\varphi(0)$ и $\psi(0)$ не должны одновременно равняться нулю.

Надо найти вычет (или величину, пропорциональную вычету) для (11) – в точке $p = \sqrt{(c^2 - \omega^2)/c^2}$, а для (12) – в точке $p = \sqrt{1 - \omega^2}$, и приравнять эти вычеты нулю.

Получаем систему:

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{c^2 - \omega^2}}{\omega} \varphi(0) + \frac{\omega^2 - 2}{2} \psi(0) &= 0, \\ \left(\frac{\omega^2 - 2}{2} \right) \varphi(0) + \sqrt{1 - \omega^2} \psi(0) &= 0. \end{aligned} \quad (13)$$

Однородная система относительно $\varphi(0)$ и $\psi(0)$ должна иметь ненулевые решения, поэтому определитель должен равняться нулю.

Проводя несложные преобразования, приходим к известному уравнению:

$$\omega^6 - 8\omega^4 + 4(c^2 + 2)\omega^2 - 4c^2 = 0, \quad (14)$$

где $c^2 = \lambda + 2\mu/\mu$.

Как известно из [1–4] это уравнение имеет вещественный корень (относительно ω^2) $\omega^2 < 1$. При $\omega^2 \geq 1$ вещественных корней нет.

Литература

1. Rayleigh, Lord (Strutt J.W.). On waves propagated along the plane surface of an elastic solid // Proc London Math. Soc. – 1885. – Vo1.17. – P. 4–11
2. Кольский Г. Волны напряжения в твердых телах. – М.: И.Л., 1955.
3. Сneddon И.И., Бери Д.С. Классическая теория упругости. – М.: И.Л., 1961.
4. Ю.А. Амензаде. Теория упругости. – М.: Высш. шк., 1976.

К ИЗМЕРЕНИЮ ВЯЗКОПЛАСТИЧНЫХ СВОЙСТВ РАСТВОРА ГЛИЦЕРИНА КАПИЛЛЯРНЫМ МЕТОДОМ

И.В. Елюхина

Выполнена интерпретация результатов экспериментов по изучению свойств 10%-ного раствора глицерина в воде в рамках реологической модели, включающей пластическую и нелинейно вязкую составляющие. Проведен выбор экспериментов, позволяющих уточнить как реологическую принадлежность жидкости, так и ее свойства.

В работах [1, 2] приведены результаты, полученные с помощью капиллярного вискозиметра и указывающие, по мнению авторов, на существование предела прочности у 10%-ного раствора глицерина в воде. Основанием для последнего утверждения служит наличие участка со скоростью течения $V \sim 0$ при малых перепадах давления ΔP в капилляре (рис. 1). Малое число экспериментальных точек в [1, 2] не позволяет сделать достаточно точные выводы, и поэтому в настоящей работе обсудим возможные реологические модели поведения и в их рамках выполним оценку характеристик среды для проверки корректности подобного описания и выбора экспериментов, необходимых для его уточнения.

Несимметричность кривых, построенных при противоположных направлениях течения, т.е. четность функции $|V| = |V|(\Delta P)$ (см. рис. 4.2 в [2]), позволяет предположить принадлежность раствора к тиксотропным средам. Для уточнения такого его представления следует провести дополнительные исследования, в частности, выбирая капилляры различной длины L и радиуса R (см., например, [3]). Далее будем полагать отсутствие этой гистерезисной петли, и, исходя из качественной картины (см. рис. 1), предложенной в [1], при данных условиях эксперимента будем считать раствор нелинейной вязкопластичной жидкостью.

Рассмотрим установившееся ламинарное течение в круглой цилиндрической трубе несжимаемой жидкости, реологические свойства которой описываются моделью Балкли–Гершеля

$$\tau = \tau_0 + K|\gamma|^n; \quad (1)$$

где τ_0 – предел текучести, K и n – постоянная и показатель степенного реологического закона, $\gamma = dv/dr$ – скорость сдвига, τ – модуль касательного напряжения; в цилиндрической системе координат относительно вектора скорости принято предположение: $v_z = v(r)$ и $v_r = v_\theta = 0$; $r = 0$ – на оси трубы, т.е. $\gamma < 0$. Заметим, что в [2] использован капилляр с $L = 83 \cdot 10^{-3}$ м, $R = 31 \cdot 10^{-5}$ м.

При течении в трубе жидкости, обладающей пределом текучести, в потоке всегда присутствует твердое ядро (рис. 2), радиус r_0 которого определяется соотношением (см., например, [3])

$$r_0 = 2\tau_0 L / \Delta P. \quad (2)$$

Скорость $v(r)$ при $r > r_0$ на рис. 2 определяется из решения дифференциального уравнения (1) при граничном условии $v(R) = 0$:

$$v(r) = \frac{2LK}{\Delta P} \frac{n}{n+1} \left[\left(\frac{\tau(R) - \tau_0}{K} \right)^{\frac{1+n}{n}} + \left(\frac{\tau(r) - \tau_0}{K} \right)^{\frac{1+n}{n}} \right]; \quad (3)$$

где [3]

$$\tau(r) = \frac{r}{2} \frac{\Delta P}{L}; \quad (4)$$

а при $r \leq r_0$ среда движется как абсолютно твердое тело со скоростью $v(r_0)$.

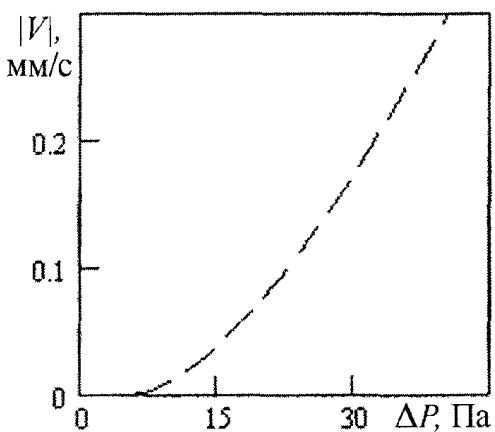
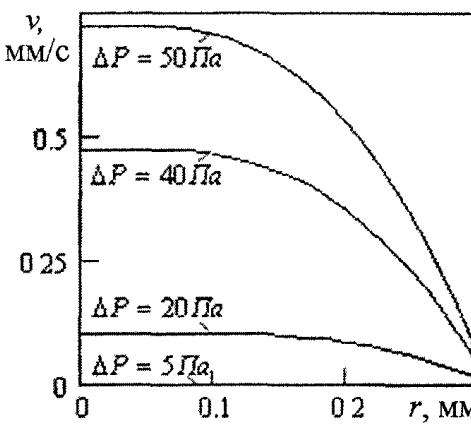
Рис. 1. Зависимость $|V| = |V|(\Delta P)$ 

Рис. 2. Профили скорости при различных сдвиговых напряжениях

Скорость V ввиду отсутствия ее конкретизации в [1, 2] будем предполагать равной средней скорости, которую определим как

$$|V| = \frac{Q_{me} + Q_{mek}}{\pi R^2}, \quad Q_{mek} = \int_{r_0}^R 2\pi r v(r) dr, \quad Q_{me} = \pi r_0^2 v(r_0); \quad (5)$$

где Q_{mek} – расход текучей компоненты, Q_{me} – расход среды через твердое ядро.

Аналитическую зависимость для средней скорости $|V| = |V|(\Delta P)$ ввиду громоздкости выражения опускаем. Значение скорости в (5), как и в (3), определялось для случая отсутствия скольжения на стенке трубы, которое можно установить экспериментально с использованием капилляров различного радиуса (см., например, [3, 4]). Оценивание неизвестных реологических свойств выполнено путем минимизации функции качества, являющейся критерием соответствия экспериментальных (см. рис. 1) и расчетных (по модели (2–5)) данных, на множестве реологических свойств среды. Были получены следующие их оценки: $r_0 = 0,011$ Па, $K = 0,024$ кг · сⁿ⁻² / м, $n = 0,65$.

На отклонение кривой вязкопластичного течения от линейного закона влияют, в частности, потери давления на изменение кинетической энергии, потери напора в резервуаре, потери давления на создание обратимой деформации при наличии упругой составляющей в свойствах среды и пр. (см., например, [5]). Обсуждение подобных ситуаций позволит скорректировать реологическую модель раствора. Для подтверждения полученных значений необходимо провести другие независимые эксперименты. Так, например, в крутильно-колебательном методе (см., например, [6]) можно осуществить предельно малые напряжения и скорости сдвига, что позволяет сделать наблюдаемыми слабо неильтоновские и, в частности, слабо пластичные свойства. Оптимальные в этом плане эксперименты для указанных выше значений реологических параметров можно реализовать при циклической частоте колебаний пустого тигля $q_0 \sim 1 \dots 10$.

Литература

1. Апакашев Р.А., Павлов В.В. Определение предела прочности и модуля сдвига воды при малых скоростях течения // МЖГ. – 1997. – № 1. – С. 3–7.
2. Апакашев Р.А. Выявление квазикристаллических свойств оксидных расплавов // Дис. д-ра хим. наук. – Екатеринбург: Урал. гос. горно-геолог. академия, 1999. – 290 с.
3. Уилкинсон У.Л. Неньютоны жидкости. – М: Мир, 1964. – 216 с.
4. Астарита Дж., Марручи Дж. Основы гидромеханики неньютоновских жидкостей. – М.: Мир, 1978. – 309 с.
5. Шульман З.П., Кордонский В.И. Магнито-реологический эффект. – Минск: Наука и техника, 1982. – 184 с.
6. Вяткин Г.П., Елюхина И.В. Моделирование движения вязкопластичной среды в цилиндре, совершающем затухающие крутильные колебания// Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2005. – Вып. 5. – №2(42). – С. 100–106.

Поступила в редакцию 17 марта 2005 г.

ОБСУЖДЕНИЕ ВОЗМОЖНОСТЕЙ МАЯТНИКОВОГО ВИСКОЗИМЕТРА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕНЬЮТОНОВСКИХ СВОЙСТВ

И.В. Елюхина

Сведений о поведении высокотемпературных сред к настоящему времени недостаточно для уверенной идентификации реологического типа, и поэтому своевременной является разработка комплекса экспериментов, позволяющих наблюдать и измерять неньютоновские свойства таких сред. В работе обсуждены возможности маятникового вискозиметра для решения подобных задач.

В рамках разработки комплекса экспериментов по изучению неньютоновских свойств высокотемпературных сред ранее были рассмотрены основные традиционные для таких жидкостей методы – крутильно-колебательный и вибрационный (см., например, [1–3]). Эти методы относятся к нестационарным; первый из них обычно используется при исследовании металлических расплавов, второй – для оксидных и шлаковых систем. С позиций неньютоновости были интерпретированы данные, получаемые с помощью стационарной капиллярной вискозиметрии (см., например, [4]), также приемлемой для сред с рабочими температурами $\sim 1200\text{--}2000$ К. Теперь обратимся еще к одному из возможных для решения подобных задач нестационарному методу – маятниковому (см., например, [5, 6]).

Пусть тонкая пластинка с площадью поверхности S подвешена с помощью подвесной системы, имеющей момент инерции I и крутильную жесткость K , и совершает вокруг точки подвеса колебания в своей плоскости с периодом τ_0 и декрементом затухания колебаний δ_0 . При помещении ее в жидкость вследствие увлечения среды ускоренно движущейся пластиной возрастает эффективный момент инерции подвесной системы, увеличивается период колебаний: $\tau > \tau_0$, и вследствие дополнительной диссипации механической энергии, обусловленной вязким трением между подвергаемыми сдвигу слоями жидкости, растет скорость затухания колебаний: $\delta > \delta_0$. Задача заключается в предсказании закона колебаний $\alpha = \alpha(t)$: зависимости от времени t угла поворота α маятника, помещенного в неньютоновскую среду массой M , и является сопряженной: движение пластины непосредственно связано с возбуждаемым ей движением среды.

Примем положения, традиционно используемые в этом методе, как то: амплитуды колебаний малы, маятник имеет большую длину – что в свою очередь позволяет допустить, что пластина совершает плоскопараллельное движение. Краевыми эффектами здесь также пренебрегаем. Тогда математическая модель будет иметь вид:

– уравнение движения маятника [5]

$$\frac{d^2\alpha}{dt^2} + \frac{rl^2}{I} \frac{d\alpha}{dt} + \frac{(mg\ell_c + K)}{I} \alpha = \frac{F_{mp}\ell}{I}; \quad (1)$$

– уравнение движения жидкости

$$\frac{\partial V}{\partial t} = \frac{1}{\rho} \frac{\partial \sigma_{zx}}{\partial z}; \quad (2)$$

– начально-краевые условия для (1, 2)

$$d\alpha/dt|_{t=0} = 0, \alpha(0) = \alpha_0, V(z, 0) = 0, V(0, t) = d\alpha/dt \cdot \ell, V(\infty, t) = 0; \quad (3)$$

где $F_{mp} = 2S \sigma_{zx}|_{z=0}$ – действующая на пластину со стороны жидкости сила трения; g – ускорение свободного падения; ℓ – расстояние от точки подвеса до центра тяжести маятника; ℓ_c – расстояние от точки подвеса до центра пластинки; m – масса маятника; r – коэффициент силы трения при колебаниях в отсутствии среды; V – компонента скорости пластины, направленная вдоль оси X ; X и Z – оси декартовой системы координат, коллинеарная и ортогональная направлению колебаний пластины соответственно ($z=0$ на пластине); α_0 – начальное угловое отклонение от положения равновесия; ρ – плотность среды. Компонента (zx -я) тензора напряжений, являющаяся в общем случае неньютоновской среды функцией f второго инварианта D тензора скоростей деформации на пластине $\sigma_{zx} = \nu \rho D_{zx} \cdot f(D)$. Здесь $D_{zx} = \frac{\partial V}{\partial z}$ – zx -я компонента тензора скоростей деформации; ν – кинематическая вязкость среды; для рассматриваемых условий течения $D = |D_{zx}|$.

Для обеспечения прецизионности измерений желательно исключить из числа наблюдаемых параметров частоту собственных колебаний ω_0 , недоступную прямым измерениям. Поэтому, рассматривая уравнение колебаний пластины в отсутствии среды и учитывая, что $\omega_0 = (\delta_0^2 + 4\pi^2)^{1/2} / \tau_0$, уравнение колебаний пластины в жидкости (1) запишем как

$$\frac{d^2 \alpha}{dt^2} + \frac{2\delta_0}{\tau_0} \frac{d\alpha}{dt} + \frac{\delta_0^2 + 4\pi^2}{\tau_0^2} \alpha = \frac{F_{mp} \ell}{I}. \quad (4)$$

Представим уравнение (4) в терминах линейного смещения пластинки из положения равновесия $x = \alpha \ell$ и введем безразмерные параметры

$$T = \frac{2\pi}{\tau_0} t, \quad U = \frac{V}{d} \frac{\tau_0}{2\pi}, \quad d = \sqrt{\nu \frac{\tau_0}{2\pi}}, \quad \zeta = \frac{z}{d}, \quad \xi = \frac{x}{d}, \quad A = \frac{Sl^2 d \rho}{I}, \quad \psi_{\zeta\xi} = \frac{\partial U}{\partial \zeta}, \quad \Phi_{tp} = 2A \cdot (\psi_{\zeta\xi} \cdot \varphi(\psi))|_{\zeta=0}; \quad (5)$$

где d – толщина пограничного слоя; $\varphi(\psi)$ – некоторая функция от ψ (обезразмеренного значения D): для ньютоновских сред $\varphi(\psi) = 1$; для нелинейно вязких сред со степенным реологическим законом и для линейных вязкопластичных сред соответственно

$$\varphi(\psi) = \psi^{m-1} \cdot (2\pi/\tau_0)^{m-1} k / (\nu \rho); \quad (6)$$

$$\varphi(\psi) = (1 + Bm/\psi) - \text{при } \psi > Bm \text{ и}$$

$$\varphi(\psi) = 0 - \text{при } \psi < Bm, \quad (7)$$

где m и k – показатель и постоянная степенного реологического закона; $Bm = \sigma_0 [\nu \rho (2\pi/\tau_0)]^{-1}$ – число Бингама, σ_0 – предел текучести;

для линейных вязкоупругих сред изосинхронный режим колебаний в отсутствии переходных процессов не нарушается, и их свойства (вязкость, время релаксации и пр.) можно описать в рамках комплексной вязкости, используя ньютоновскую модель поведения.

Система (2)–(4) в терминах параметров (5) имеет вид:

$$\frac{d^2 \xi}{dT^2} + \frac{\delta_0}{\pi} \frac{d\xi}{dT} + \left(\left(\frac{\delta_0}{2\pi} \right)^2 + 1 \right) \xi = \Phi_{tp}; \quad (8)$$

$$\frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial \psi_{\zeta\xi}}{\partial \zeta} \varphi(\psi); \quad (9)$$

$$\frac{d\xi}{dT}|_{T=0} = 0, \quad \xi(0) = \xi_0, \quad U(\zeta, 0) = 0, \quad U(0, T) = \frac{d\xi}{dT}, \quad U(\infty, T) = 0. \quad (10)$$

Легко заметить, что при данной постановке и допущениях задача эквивалентна задаче для вибрационного вискозиметра, совершающего затухающие колебания (за тем исключением, что в последнем случае $A = Sd\rho/m$, где m – масса подвесной системы). Поэтому для дальнейшего обсуждения возможностей маятникового вискозиметра следует обратиться к соответствующим работам по вибрационному методу (к примеру, [2]). Для сравнения заметим также, что для маятникового вискозиметра параметры колебаний в отсутствии среды равны

$$\tau_0^2 = \frac{4\pi^2 I^2}{I(mg\ell_c + K) - 0,25r^2l^4}, \delta_0 = \frac{1}{2} \frac{r\ell^2\tau_0}{I}; \quad (11)$$

для вибрационного вискозиметра –

$$\tau_0^2 = \frac{4\pi^2 m^2}{m\gamma - 0,25r^2}, \delta_0 = \frac{1}{2} \frac{r\tau_0}{m}, \quad (12)$$

где γ – жесткость упругого элемента.

Отдельно отметим, что помимо вектора состояния системы (величин U и ξ в (8, 9)) и пространственно-временных координат (T и ζ) в систему уравнений входит только один параметр – A , безразмерный комплекс, характеризующий свойства среды и условия эксперимента, объединяющий все параметры установки. Изменение A позволяет варьировать условия эксперимента и выбирать оптимальные, определяемые совокупностью причин, как-то: достаточным числом колебаний до момента, после которого уверенная регистрация α невозможна; значительным изменением периода и декремента затухания в процессе колебаний – для большей наблюдаемости неニュотоновских эффектов; чувствительностью оценок реологических свойств среды к ошибкам в измеряемых в эксперименте параметрах и др.

Маятниковый метод математически подобен вибрационному для режима установившихся колебаний, но технически он реализуется иначе, в частности, обладает различными с вибрационным методом возможностями для изменения условий эксперимента, измерения наблюдаемых в опыте параметров, отклика на шум, организации переходных процессов и пр. В связи с этим экспериментатору при выявлении неニュотоновских свойств высокотемпературных сред полезно иметь в распоряжении и такую экспериментальную базу для проверки согласованности получаемых данных этим методом и иными.

Литература

1. Елюхина И.В. Оценивание свойств неニュотоновских сред крутильно-колебательным методом // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2004. – Вып. 4. – № 8(37). – С. 18–21.
2. Елюхина И.В. Вибрационный метод затухающих колебаний для измерения свойств ньютоновских и неニュотоновских сред // Тр. XI Рос. конф. «Строение и свойства металлических и шлаковых расплавов». – Екатеринбург, 2004. – Т. 2. – С. 223–227.
3. Вяткин Г.П., Елюхина И.В. Идентификация нелинейно вязких и вязкопластичных свойств вибрационным методом // Матер. 22 симп. по реологии. – М.: ИНХС РАН, 2004. – С. 29.
4. Елюхина И.В. К измерению вязкопластичных свойств раствора глицерина капиллярным методом // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2005. – Вып. 5. – №2(42). – С. 110–111.
5. Росин Г.С. Маятниковый вискозиметр // Завод. лаб. – 1967. – Т. 33 . – №8. – С. 1027–1028.
6. Шпильрайн Э.Э., Фомин В.А., Сковородько С.Н., Сокол Г.Ф. Исследование вязкости жидких металлов. – М.: Наука, 1983. – 243 с.

Поступила в редакцию 19 марта 2005 г.

СИМВОЛИЧЕСКОЕ «ДЕЛЕНИЕ» ВЕКТОРОВ В МЕХАНИКЕ СПЛОШНОЙ СРЕДЫ

О.С. Садаков

Известно, что тензорное исчисление – это алгебра сложений и умножений. Однако при проведении выкладок и преобразований может оказаться удобной также и приведенная в заголовке условная промежуточная операция. В механике сплошной среды обычны операторы линейных функций – например, вектор-функции векторного аргумента. Такими операторами являются тензор напряжений, тензор дисторсии и другие. Работа с этими тензорами может быть облегчена, если ввести символическую операцию «дробь» (ниже мы будем кавычки опускать). В статье обсуждается это обозначение, впервые принятное в работе [1]. Показаны свойства дроби и дан краткий обзор основных понятий кинематики, использующий эту символическую запись. Мы ограничились случаем однородного напряженно-деформированного состояния и исключили пока наиболее запутанную картину скоростей изменения напряжений и деформаций.

1. Пусть задана функция

$$y = A \cdot x \quad (1)$$

(x – множество произвольных векторов, y – результаты их преобразования с помощью оператора A – двухвалентного тензора, точкой обозначается скалярное произведение). Тензор A можно условно обозначать в виде дроби

$$A = y/x. \quad (2)$$

Косая черта используется здесь в связи с некоммутативностью дроби: символ аргумента x должен быть ниже и правее. Возможно, оператор B функции $y = x \cdot B$ можно было бы обозначить $x \backslash y$, но, чтобы не усложнять, мы используем для B обычный знак транспонирования $B = (y/x)^\top$.

Удобство предлагаемого обозначения связано с его довольно очевидными и простыми свойствами. Например,

$$x/x = I \quad (3)$$

(I – единичный тензор, или тензор тождественного преобразования),

$$(z/y) \cdot (y/x) = z/x \quad (4)$$

(произведение операторов). Отсюда, в частности, следует, что $y/x \cdot x/y = I$, эти тензоры взаимно обратны. Кроме того,

$$(z + y)/x = z/x + y/x; \quad (5)$$

скаляры в числителе и в знаменателе сокращаются:

$$6y/(2x) = 3y/x, \quad (6)$$

справедливо и такое выражение (T – некоторый тензор):

$$T \cdot (y/x) = (T \cdot y)/x. \quad (7)$$

Легко показать, что если y/x равен z/u , то этому тензору можно придать и третий вид:

$$y/x = z/u = (y+z)/(x+u). \quad (8)$$

Для доказательства обозначим $A = y/x = z/u$, то есть

$$y = A \cdot x, \quad z = A \cdot u.$$

Сложив эти выражения, получим $y+z = A \cdot (x+u)$, или $A = (y+z)/(x+u)$. Напомним, что речь идет не о четырех векторах $x..u$, а о четырех множествах векторов, связанных между собой указанным образом.

2. Для определения тензора y/x достаточно знать судьбу трех аргументов (для определенности принято, что векторное пространство трехмерно; это пригодится ниже):

$$y_\alpha = A \cdot x_\alpha \quad \alpha = 1, 2, 3.$$

Не обязательно, но удобно, чтобы векторы x_α были направлены вдоль ортов декартова базиса $\{e_i\}$ ($x_\alpha = x_\alpha e_\alpha$, x_α – длины этих векторов). Учитывая, что $A = A_i e_i$, где A_i – искомые проекции тензора ($A_i = A \cdot e_i$), получим

$$y_\alpha = A \cdot (x_\alpha e_\alpha) = A_\alpha x_\alpha$$

и, таким образом, зная три вектора x_α и три вектора y_α найдем

$$A = A_\alpha e_\alpha = \sum_{\alpha=1}^3 y_\alpha e_\alpha / x_\alpha \quad (9)$$

Это выражение в некоторой мере оправдывает принятное обозначение (2).

3. Переходя к анализу основных тензоров в механике деформируемого твердого тела, удобно рассмотреть вначале случай однородного напряженно-деформированного состояния.

Тензор напряжений может быть записан в виде дроби

$$\sigma = p/n, \quad (10)$$

чтобы подчеркнуть смысл этого оператора линейной зависимости напряжения p на произвольной площадке от ориентации n (n – орт нормали) этой площадки, а также напомнить о необходимости знания напряжений на трех площадках для его определения. Последнее следует, в частности, из разложения тензора на три диады (9):

$$\sigma = \sum_{\alpha=1}^3 p_\alpha e_\alpha \quad (11)$$

(учтена единичность векторов n ; p_α – напряжения на базисных площадках). В матричной записи координат тензора напряжений векторы p_α отображаются столбцами матрицы напряжений. Обсуждаемый тензор называется тензором напряжений Коши; предусматривается, что среда деформирована и материальные волокна, составляющие рассматриваемые площадки, могли изменить в предыстории свои ориентацию и размеры.

4. Наибольшую пользу, как нам представляется, дробь может оказать при анализе деформированного состояния, особенно, в случае отказа от гипотез малости смещений и деформаций. В этих геометрически нелинейных задачах наиболее нужна ясность при прослеживании сложной судьбы пучков материальных волокон (их положение в начальном, недеформированном состоянии будем характеризовать векторами l_0), пока они не попадут в текущее, актуальное состояние – l . Можно показать, что зависимость $l(l_0)$ является линейной.

Если линейность упомянутой выше функции $p(n)$ (10) следует из условий равновесия (и, естественно, из гипотезы сплошности среды), то линейность преобразования волокон l_0 в l вытекает из гипотезы сплошности и из упомянутого выше допущения об однородности деформированного состояния. При анализе неоднородного напряженно-деформированного состояния последнее допущение относится к бесконечно малой окрестности каждой рассматриваемой материальной точки и вытекает из положения о дифференцируемости функций, описывающих смещения.

Наиболее популярная количественная мера деформирования – оператор

$$F \equiv l/l_0 \quad (12)$$

Он носит в научной литературе несколько необъяснимых названий (например, градиент деформации, градиент места); мы его, вместе с тремя его родственниками

$$D \equiv \Delta l/l_0 \quad \Delta l \equiv l - l_0, \quad D = F - I, \quad (13)$$

$$H \equiv l_0/I = F^{-1}, \quad (14)$$

$$K \equiv \Delta l/l = I - H \quad (15)$$

будем называть тензором дисторсии, понимая под дисторсией деформирование, и жесткий поворот (обычно, то и другое вместе).

По аналогии с вектором напряжений, вектор $D \cdot n$ (n – единичный вектор) можно назвать вектором дисторсии; он представляет изменение Δn единичного волокна n в результате дисторсии:

$$D = \Delta n/n = \sum_{\alpha=1}^3 (\Delta e_\alpha) e_\alpha, \quad (16)$$

для его задания достаточно знать три вектора дисторсии – судьбу трех (не обязательно начально ортогональных, как e_i) волокон, естественно, линейно независимых. В матричной записи тензора D (в декартовом базисе) столбцы матрицы D_{ij} представляют векторы дисторсии: изменения Δe_α единичных волокон, которые вначале были направлены вдоль базисных осей e_α .

5. В случае больших деформаций удобнее работать с тензором F . Как и любой двухвалентный тензор, он всегда может быть факторизован, то есть представлен в виде произведения сим-

метричного и ортогонального тензора. Если в этом представлении симметричный тензор является единичным, то исходный тензор дисторсии является ортогональным и наоборот, если ортогональный равен I , то тензор дисторсии симметричен и, значит, найдется такой декартов базис $\{c_i\}$, в котором дисторсия принимает вид

$$\mathbf{F} = \sum_{\alpha=1}^3 k_\alpha c_\alpha \quad (17)$$

где k_α – главные коэффициенты длины, отличающиеся от главных деформаций ε_α на единицу ($k_\alpha = 1 + \varepsilon_\alpha$).

Другой крайний случай: тензор \mathbf{F} ортогонален. В такой дисторсии деформация отсутствует, происходит жесткий поворот (тензор поворота обозначают обычно R) всех волокон вокруг общей оси n на некоторый угол φ .

$$\mathbf{R} = nn + (I - nn)\cos\varphi + \mathcal{E} \cdot n \sin\varphi. \quad (18)$$

Здесь

$$\mathcal{E} \equiv -p \delta_{ijk} e_i e_j e_k \quad (19)$$

– трехвалентный изотропный тензор, кососимметричный относительно любой пары индексов. В последнем выражении e_i – орты декартова базиса, δ_{ijk} – символы Веблена (1, 0 или -1 в зависимости от значений i, j и k), p – символ «правизны» этого базиса: 1 для правого и -1 для левого базиса. Этот тензор, называемый иногда тензором Леви-Чивитта, позволяет заменить векторное произведение двойным скалярным ($a \cdot b = ab \cdot \mathcal{E} = a \cdot \mathcal{E} \cdot b = \mathcal{E} \cdot ab$).

Определитель тензора поворота равен единице, обратный ему тензор получается транспонированием (происходит простая замена угла φ на $-\varphi$).

Если мы знаем координаты тензора R , то, сворачивая тензор скалярно и векторно, нетрудно получить ось поворота n и угол φ .

6. В общем случае дисторсия \mathbf{F} представляет и деформирование, и жесткий поворот. Факторизация

$$\mathbf{F} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{U} \quad (20)$$

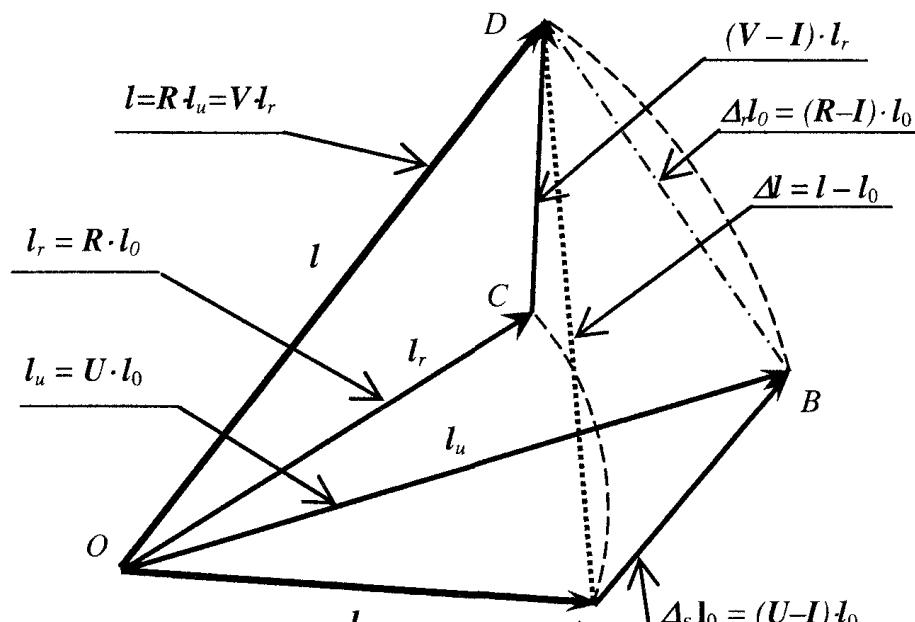
позволяет выделить эти два преобразования. Если начальное положение волокна обозначить \mathbf{l}_0 (см. рисунок), то произведение $\mathbf{F} \cdot \mathbf{l}_0$ предстанет в виде двух движений ($\mathbf{R} \cdot \mathbf{U} \cdot \mathbf{l}_0$): вначале происходит деформирование $\mathbf{l}_u = \mathbf{U} \cdot \mathbf{l}_0$ (волокно \overline{OA} занимает положение \overline{OB} ; если это волокно не отвечает главной оси деформации, то оно не только изменяет свою длину, но и поворачивается), затем происходит жесткий поворот всего тела (или всей окрестности) $\mathbf{l} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{l}_u$. Иначе говоря, записи (20) можно придать вид $\mathbf{F} = \mathbf{l}/\mathbf{l}_0 = \mathbf{l}/\mathbf{l}_u \cdot \mathbf{l}_u/\mathbf{l}_0$.

Подчеркнем, что речь не идет о судьбе одного волокна. Удобно представить пучок волокон одинаковой длины, но разных (всех возможных) направлений. Если их начала совмещены, то они заполняют вначале материальную сферу. Линейность преобразования (20) означает, что их новое положение отвечает эллипсоиду. Вначале сфера деформируется (тензор коэффициентов длины $\mathbf{U} = \mathbf{l}_u/\mathbf{l}_0$, соответствующий тензор деформации $\mathbf{\varepsilon}_u = \mathbf{U} - I$), главные оси эллипсоида совпадают с главными осями тензора деформации. Затем происходит жесткий поворот $\mathbf{R} = \mathbf{l}/\mathbf{l}_u$; эллипсоид поворачивается без деформации, занимая текущее положение \mathbf{l} . Главные оси эллипсоида отвечают новому положению главных волокон (деформации которых экстремальны), но направления этих волокон не совпадают с начальными.

Ничем не хуже другой взгляд на события: $\mathbf{F} = \mathbf{l}/\mathbf{l}_0 = \mathbf{l}/\mathbf{l}_r \cdot \mathbf{l}_r/\mathbf{l}_0 = \mathbf{V} \cdot \mathbf{R}$: первое движение – жесткий поворот \mathbf{l}/\mathbf{l}_0 без деформирования ($\overline{OA} \rightarrow \overline{OC}$ на рисунке), второе – деформирование без жесткого поворота $\mathbf{V} = I + \mathbf{\varepsilon}_r$. Из однозначности факторизаций $\mathbf{F} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{U} = \mathbf{V} \cdot \mathbf{R}$ следует, что ортогональные тензоры \mathbf{l}/\mathbf{l}_u и \mathbf{l}/\mathbf{l}_0 одинаковы (\mathbf{R}), а симметричные \mathbf{U} и \mathbf{V} – различны, хоть и имеют одинаковые главные значения $k_i = 1 + \varepsilon_i$ (где ε_i – главные деформации). Они отличаются главными направлениями c_i :

$$\mathbf{U} = k_i c_i^u, \quad \mathbf{V} = k_i c_i^v, \quad c_i^v = \mathbf{R} \cdot c_i^u. \quad (21)$$

Иногда говорят [2], что \mathbf{U} и \mathbf{V} – один и тот же тензор, но нам представляется очевидным, что, например, растяжение вдвое вдоль оси x или вдоль оси y – это две различные деформации. В частности, в анизотропном теле для этих двух деформаций потребуются различные нагрузки.



Основные тензоры дисторсии

7. В каждодневных прочностных расчетах (сопротивление материалов, теория упругости и даже теория пластичности и ползучести) принято упрощать картину деформирования, гипотетически полагая, что смещения, деформации и повороты волокон бесконечно малы. Это означает, что волокна l_0 и l неотличимы, и при анализе деформаций (геометрически линейный подход) опираются на тензор дисторсии $D = \Delta I/I$. Его делят на симметричное и кососимметричное слагаемые

$$D = \varepsilon + \theta, \quad (22)$$

то есть считают, что приращение ΔI складывается из ΔI_ε , связанного с деформацией ($\varepsilon = \Delta I_\varepsilon l_0$), и ΔI_θ , вызванного жестким поворотом ($\theta = \Delta I_\theta l_0$). Задачу оценки прочности научились решать, не привлекая к рассмотрению поворотов, и в расчетах фигурируют только деформации $\Delta I_\varepsilon l_0$.

8. Полезно иметь в виду, что любой кососимметричный тензор можно представить в виде произведения

$$K = \mathcal{E} \cdot \omega, \quad (23)$$

где \mathcal{E} – тензор Леви-Чивитта, ω – сопутствующий тензору K вектор (его можно определить, векторно сворачивая тензор K).

В частности, кососимметричный тензор θ , которым определяют жесткий поворот в геометрически линейной постановке задачи, представляет результат скалярного умножения тензора \mathcal{E} на вектор, который называют вектором поворота. Естественно, лишь бесконечно малый поворот можно отображать вектором; тогда вектор результата двух поворотов представляет сумму векторов этих поворотов.

Нетрудно оценить ошибку от использования в линейном варианте (22) кососимметричного тензора $\Delta I/I_0$ вместо ортогонального (18) I/I_0 . Из последнего следует вычесть единичный тензор, и ошибка определяется *симметричным* слагаемым в $R-I$, равным $(I-nn)(1-\cos\varphi)$. Она наиболее заметна на волокнах, ортогональных n , и для последних характеризуется числом $(1-\cos\varphi)/\sin\varphi$, равным (при малых φ) $\varphi^2/2$. Таким образом, с ошибкой менее 1% мы можем пользоваться геометрически линейным вариантом до углов 2 %, то есть $1,15^\circ$.

Литература

- Скаляр и тензор логарифмической деформации/ О.С. Буслаева, О.С. Садаков, А.А. Шапиро // Научно-технические ведомости СПбГТУ. – Санкт-Петербург. – 2003. – 3 (33). – С.125–129.
- Belytschko T., Liu W.K., Moran B. Finite Elements for Nonlinear Continua and Structures. McCormick School of Engineering and Applied Science Northwestern University Evanston, IL 60208 copyright 1996. Published by Wiley.

Поступила в редакцию 6 февраля 2005 г.

НЕМАЛЫЕ КОЛЕБАНИЯ И КРУГОВРАЩЕНИЯ МАЯТНИКА

Ю.П. Сердега

В работе рассмотрены немалые колебания и круговращения физического маятника. Найдены аппроксимирующие зависимости, позволяющие определять периоды немалых колебаний и круговращений маятника в инженерной практике, не прибегая к специальным таблицам, или трудоемким вычислениям.

Проведем исследование движения диска, который можно представить как физический маятник, если подвесить его, выбрав за ось подвеса любую точку за исключением центра масс, и рассмотрим движение этого тела при его **немалых** колебаниях и круговращениях (рис. 1).

Начало неподвижной системы координат $O_1X_1Y_1$ совместим с осью подвеса Z , а оси подвижной системы проведем так, чтобы неподвижная ось X_1 и подвижная X , проходящая через ось подвеса и центр масс, составляли угол отклонения маятника φ .

Дифференциальное уравнение движения физического маятника можно получить из закона изменения момента количества движения тела:

$$\dot{\varphi} + \frac{m g r_c}{I_0} \sin \varphi = 0. \quad (1)$$

При малых колебаниях маятника, когда допустимо принять $\sin \varphi = \varphi$, решением дифференциального уравнения (1) является: $\varphi = \varphi_0 \sin(\omega_0 t)$.

Здесь ω_0 – собственная частота колебаний маятника – $\omega_0 = \sqrt{g/l_{np}}$;

l_{np} – приведенная длина маятника – $l_{np} = \frac{I_0}{r_c m}$;

I_0 – момент инерции маятника относительно оси подвеса;

m – масса физического маятника;

r_c – расстояние от оси подвеса до центра масс.

Соответственно, в этом случае период колебаний физического маятника – $T_0 = 2\pi\sqrt{l_{np}/g}$.

Но при **немалых** колебаниях маятника, когда угол φ **значительно** отличается от $\sin \varphi$ и аналитического решения дифференциального уравнения не существует, период колебания находят, используя таблицы специальных функций, или через поправочный коэффициент по формуле:

$$T = k_t \cdot T_0,$$

где k_t – поправочный коэффициент немалых колебаний:

$$k_t = \frac{\sqrt{2}}{\pi} \int_0^{\varphi_0} \frac{d\varphi}{\sqrt{\cos(\varphi) - \cos(\varphi_0)}}. \quad (2)$$

Интеграл, входящий в это выражение, не относится к числу элементарных, однако его можно определить и, не прибегая к нахождению полного эллиптического интеграла первого рода по специальным таблицам, а рассчитать численным методом. На рис. 2 тонкой линией представлена зависимость поправочного коэффициента k_t , рассчитанная по формуле (2) этим методом.

Приближенное решение уравнения (2), когда разложение функции $\sin(\varphi)$ в ряд ограничено двумя членами, дает известное выражение поправочного коэффициента [1]:

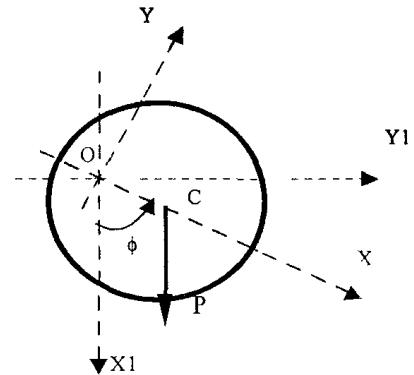


Рис. 1. Физический маятник

$$k_{t2}(\phi_0) = 1 + \frac{\phi_0^2}{16}.$$

Анализ зависимости поправочного коэффициента k_t показывает, что она носит экспоненциальный характер, а потому может быть достаточно точно аппроксимирована функцией:

$$k_{te}(\phi_0) = 1 + \frac{\phi_0^2}{16} \left[1 + \frac{e^{(\phi_0/2\pi)^3}}{5,85 - 5(\phi_0/2\pi)^3} \right]. \quad (3)$$

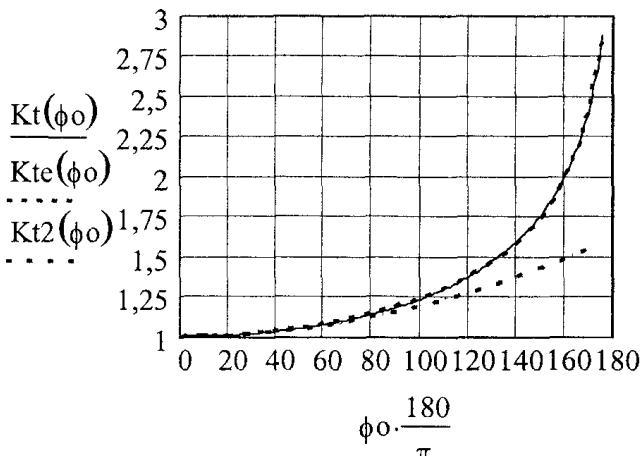


Рис. 2. Поправочные коэффициенты немалых колебаний

Погрешность расчета поправочного коэффициента немалых колебаний маятника функцией (3) зависит от начального отклонения – ϕ_0 , но не превышает 1% даже при отклонениях до 176° , тогда как погрешность расчета с использованием известной зависимости $k_{t2}(\phi_0)$, как видно из рис. 2, значительна уже при $\phi_0 \geq 120^\circ$.

В случаях, когда физический маятник совершает **круговращение**, закономерность изменения угловой скорости маятника в функции угла φ определяется согласно закону изменения кинетической энергии из уравнения

$$\omega(\varphi) = \sqrt{\omega_0^2 + \frac{2g}{l_{np}}(1 + \cos \varphi)}. \quad (4)$$

Период круговращения маятника зависит как от угловой скорости прохождения верхнего положения – ω , так и от собственной частоты колебаний – ω_0 , и определяется неразрешимым в элементарных функциях интегралом:

$$T_k(\omega) = \frac{\sqrt{2}}{2\omega_0} \int_0^{2\pi} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 + \cos \varphi + 0,5(\omega/\omega_0)^2}}. \quad (5)$$

Приближенное решение, которое получают, вводя эллиптические функции Якоби [1], может быть рекомендовано лишь для определения периода круговращения при значительных скоростях круговращения, причем период круговращения маятника – T_{kv} найден в нем через скорость прохождения нижнего положения – ω_m :

$$T_{kv} = \frac{2\pi}{\omega_m} \left[1 + \frac{g}{l_{np}} \left(\frac{1}{\omega_m} \right)^2 + \dots \right]. \quad (6)$$

Таким образом, в инженерной практике целесообразно прибегнуть к аппроксимирующим выражениям поправочного коэффициента круговращения – K_k и периоду гармонических колебаний маятника – T_0 , для определения периода его круговращения по формуле:

$$T_{kv} = K_k \cdot T_0. \quad (7)$$

Исследования показывают, что закономерность изменения действительного значения поправочного коэффициента круговращения K_k , найденного численным путем, растет по мере снижения скорости прохождения верхнего положения ω и падает с ее увеличением (рис. 3). Если выразить ω_m через ω и ω_0 , то можно получить, преобразуя выражение (6), следующую формулу поправочного коэффициента круговращения $K_1(\omega)$:

$$K_1(\omega) = \frac{1}{\sqrt{4 + \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2}} \cdot \frac{5 + \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2}{4 + \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^2}. \quad (8)$$

Тонкая пунктирная линия, построенная по этой формуле, показывает, что она достаточно близка к действительным значениям (рис. 3) при скоростях $\omega/\omega_0 > 4$, но при малых скоростях, особенно если $\omega/\omega_0 < 1$, погрешность расчета растет и при $\omega/\omega_0 < 0,5$ уже превышает 30% (рис. 4).

Анализ изменения поправочного коэффициента круговращения K_k показывает, что если при малых значениях скоростей (в интервале $0 < \omega/\omega_0 < 1$), его аппроксимировать функцией $K_2(\omega)$:

$$K_2(\omega) = 0,643 \cdot e^{\frac{\pi}{2} [1 - (\omega/\omega_0)^{0.3}]}, \quad (9)$$

а в интервале скоростей $1 < \omega/\omega_0 < 4$ – функцией $K_3(\omega)$:

$$K_3(\omega) = 0,643 \cdot e^{-(\omega/\omega_0 - 1)^{0.46}} + \left(\frac{\pi}{2} - 1 \right) \cdot \frac{\omega_0}{\omega} \cdot \left[1 - e^{-(\omega/\omega_0 - 1)^{0.46}} \right], \quad (10)$$

то погрешность расчета K_k по этим формулам в пределах рассматриваемого интервала, как видно из рис. 4, не превысит 1,2% (жирная пунктирная кривая).

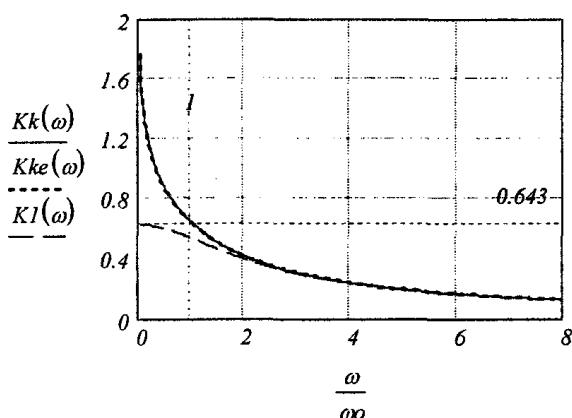
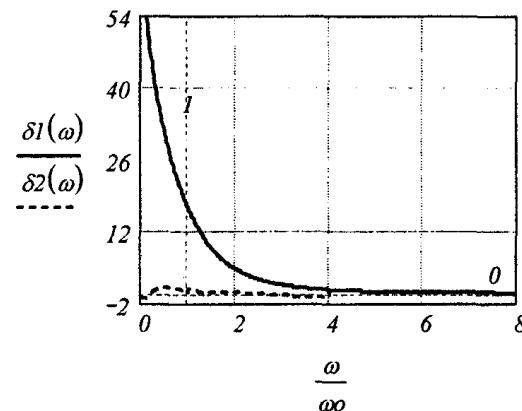


Рис. 3. Поправочные коэффициенты круговращения

Рис. 4. Погрешность K_k по формулам (8)–(10)

Заключение

Найдены аппроксимирующие зависимости для определения периода немалых колебаний маятника в функции его начального угла отклонения, а также периода круговращения маятника в функции скорости прохождения верхнего положения. Даны оценки точности аппроксимирующих формул, рекомендуемых для применения в инженерной практике.

Литература

1. Лойцянский Л.Г., Лурье А.И. Курс теоретической механики. – М.: Наука, 1983. – Т. II.– С. 493–504.

Поступила в редакцию 12 января 2005 г.

О СТРУКТУРЕ АКУСТИЧЕСКОГО ПОЛЯ, ВОЗНИКАЮЩЕГО ПРИ ДИФРАКЦИИ РЭЛЕЕВСКОЙ ВОЛНЫ НА ОГРАНИЧИВАЮЩЕЙ ПЛОСКОСТИ, РАСПОЛОЖЕННОЙ ПОД УГЛОМ К ПОВЕРХНОСТИ

Х.Б. Толипов

В рамках линейной теории упругости рассматривается взаимодействие рэлеевской волны с плоской поверхностью. Построено спектральным методом решение задачи о генерации возмущений, вызываемых падающей волной. Полученные выражения описывают пространственные структуры дифрагированных волн, согласующиеся с известными измерениями.

1. Введение

Интерес к изучению рассеяния рэлеевских волн на наклонной поверхности, стимулированный пионерскими экспериментальными работами [1, 2], вызван как логикой развития теории упругости, так и необходимостью решения акустических прикладных задач дефектоскопии, сейсмологии и др. Отметим, что эта задача интересна как с математической точки зрения, так и с физической.

Поверхность, по которой распространяется рэлеевская волна, и наклонная плоскость образуют угловую область, в которой при набегании волны возникают сложные акустические процессы. В результате дифракции с наклонной плоскостью падающего поля возникают как поверхностные, так и расходящиеся объемные волны, структура которых зависит от углового положения плоскости. Генерация этих волн является результатом совместного действия и конкуренции продольных и сдвиговых составляющих рэлеевской волны, вызываемых первичной волной и представляет собой интересное явление, позволяющее глубже понять свойства рэлеевских волн и наблюдать их новые проявления. Поскольку закономерности изменения структуры дифрагированных волн зависят от структуры профиля волновых возмущений, представляет большой интерес исследование этой задачи для различных углов наклона плоскости.

Набегающая на плоскость волна вызывает возмущение поверхности, которое можно рассматривать как источник вторичных волн. Излучающая часть плоскости, расположенной под произвольным углом к поверхности, совершает периодические движения с частотой ω набегающей на наклонную плоскость волны. Волновой вектор падающей волны k , составляет некоторый угол θ с направлением движения волны деформаций на плоскости, характеризуемой волновым числом k_r , такой, что

$$\cos \theta = k_r / k. \quad (1)$$

Учитывая, что $k = \omega/v$, соотношение (1) для дальнейшего анализа удобно переписать в виде:

$$\cos \theta = v_r / v_r.$$

Если скорость движущихся возмущений превышает фазовую скорость звука v в упругой среде, то волновой вектор излучаемых волн k , образует с вектором скорости v угол θ_0 , причем

$$\cos \theta_0 = v / v_r. \quad (2)$$

Угол θ_0 принимает вещественное значение лишь в том случае, если выполняется неравенство $v_r > v$, т.е. скорость источника превосходит фазовую скорость сдвиговой волны в среде. В этом случае возникает объемная волна с азимутальным направлением θ_0 , определяемым тоже соотношением (1).

Наибольший интерес представляет движение источника возмущений при скоростях меньших фазовых скоростей волн в среде.

Угол θ_0 при этих скоростях принимает мнимое значение, а пространственная структура сдвиговой волны будет описываться выражением [3]:

$$U = U_0 \exp(ikx) \exp(-\sqrt{k^2 - k_r^2}) z, \quad (3)$$

с переменной z направленной вглубь среды. Аналогичные соотношения будут характеризовать поле продольных волн, характеризуемых волновым вектором k_ℓ . Полученное выражение представляет собой произведение осциллирующей функции, определяемой формой падающего на плоскость поля, и экспоненциально затухающей функции, которую можно интерпретировать как пограничный волновой слой, описываемый пространственным масштабом λ , зависящим от фазовой скорости волны в среде:

$$\lambda = \left(k^2 - k_t^2 \right)^{-0.5}.$$

Скорость этой волны снижается по двум причинам. Во-первых, в твердых телах на границе сред происходит взаимная трансформация продольных волн в сдвиговые. Поэтому при распространении поверхностной волны, состоящей из сдвиговых и продольных составляющих, плотность энергии волны монотонно падает, т.к. сдвиговая волна движется медленнее продольной.

Во-вторых, согласно выражению (3) с уменьшением скорости волны толщина пограничного волнового слоя растет. При этом происходит перестройка его пространственной структуры, т.к. плотность энергии волны снижается, рассредоточиваясь по большему объему. Скорость волны монотонно уменьшается до тех пор, пока скорости продольной и сдвиговой составляющих не выровняются, соответственно скорости рэлеевской волны. Этот эффект является специфическим в твердых телах и не имеет аналогов в других средах.

Введем параметр просачивания, определяемый соотношением:

$$\theta_0 = \arccos(k, \lambda),$$

который можно рассматривать в качестве меры баланса между эффектами просачивания рэлеевской волны на наклонную плоскость и генерации объемных волн. Таким образом, согласно вышесказанному, можно выделить две характерные области. При $\theta < \theta_0$ падающая волна проходит на наклонную плоскость с неизменной пространственной структурой, а при $\theta > \theta_0$ происходит преобразование в объемные волны, сопровождающееся перестройкой структур волн.

Вторичные волны в силу неоднородности возмущающих сил можно представить в виде набора спектра пространственных гармоник Фурье. Можно сказать, что наличие этой неоднородности приводит к появлению поверхностных и объемных волн (сдвиговых и продольных) с другими направлениями волнового вектора k , соответственно решение будет представлено линейной комбинацией волн вида (3) с различными направлениями k . Отметим, что в этой задаче рассеяние вызвано, в основном, не изменением упругих свойств среды, а неоднородностью падающей волны. Трансформация первичной волны в объемные является основным механизмом, определяющим потери энергии колебаний при переходе рэлеевской волны на наклонную плоскость.

2. Решение задачи

Рассмотрим полу平面, связанная с декартовой системой координат (ε, η) , с осью η , направленной вглубь среды, по которой распространяется плоская монохроматическая волна перпендикулярно линии излома с наклонной плоскостью.

Задача определения дифрагированного поля, возбуждаемого падающей волной, сводится к вычислению смещений U_ℓ и U_t , удовлетворяющих уравнениям:

$$\Delta U_\ell + k_\ell^2 U_\ell = 0, \quad \Delta U_t + k_t^2 U_t = 0, \quad (4)$$

и граничным условиям:

$$\sigma_{xz} = -\sigma_{xz}^\circ, \quad \sigma_{zz} = -\sigma_{zz}^\circ \quad \text{при } z = 0. \quad (5)$$

Здесь обозначено c_ℓ , c_t – скорости распространения соответственно продольных и поперечных волн, ω – круговая частота, σ_{xz}° и σ_{zz}° – напряжения, вызываемые смещениями падающей рэлеевской волны, рассматриваемые затем как источник вторичных волн, λ , μ – постоянные Ламэ.

Таким образом, система уравнений (4) с граничными условиями (5) полностью описывает пространственную структуру поля на плоскости.

Если ввести продольный и поперечный потенциалы, связанные со смещениями соотношениями

$$U_\ell = \operatorname{grad} \Phi, \quad U_t = \operatorname{rot} \psi,$$

то систему уравнений (4), (5) можно переформулировать в следующем виде:

$$\Delta\Phi + k_t^2\Phi = 0, \quad \Delta\psi + k_t^2\psi = 0. \quad (6)$$

$$-\frac{\partial^2\Phi}{\partial x^2} - \frac{k_t^2}{2}\Phi + \frac{\partial^2\psi}{\partial x\partial z} = -\sigma_{zz}^\circ, \quad (7)$$

$$2\frac{\partial^2\Phi}{\partial x\partial z} + \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} - \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} = -\sigma_{xz}^\circ,$$

Колебания на наклонной плоскости возбуждаются плоской рэлеевской волной, описываемой выражениями:

$$\Phi = \exp[i(k_r\varepsilon - \omega t) - q\eta], \quad (8)$$

$$\psi = p \exp[i(k_r\varepsilon - \omega t) - s\eta], \quad (9)$$

$$\text{где } q = \sqrt{k_r^2 - k_t^2}, \quad s = \sqrt{k_r^2 - k_t^2}, \quad p = -\sqrt{\frac{q}{s}}i.$$

При установившемся режиме колебаний, который и рассматривается дальше, зависимость всех величин от времени носит гармонический характер. Общий множитель $\exp(-i\omega t)$ в дальнейших выкладках опускается.

Решение задачи будем рассматривать для малых углов $\theta (\theta < 90^\circ)$. В этом случае, что принципиально важно, структура набегающей на плоскость волны остается неизменной.

Введем локальную систему координат (x, z) , связанную с наклонной плоскостью, в которой ось z направлена вглубь среды.

С учетом преобразований [4], тензоры напряжений на плоскости в системе координат (x, z) принимают вид:

$$\begin{aligned} \sigma_{xz}^\circ &= \sigma_{zz}' \sin(\theta) + \sigma_{xz} \cos(\theta), \\ \sigma_{zz}^\circ &= \sigma_{zz} \cos(\theta) + \sigma_{xz}' \sin(\theta), \end{aligned} \quad (10)$$

с обозначениями:

$$\begin{aligned} \sigma_{xz} &= P(k_{1x}) \exp(ik_{1x}x) + pQ(k_{2x}) \exp(ik_{2x}x), \\ \sigma_{zz} &= R(k_{1x}) \exp(ik_{1x}x) + pS(k_{2x}) \exp(ik_{2x}x), \\ \sigma_{xz}' &= P(k_{1z}) \exp(ik_{1z}z) + pQ(k_{2z}) \exp(ik_{2z}z), \\ \sigma_{zz}' &= R(k_{1z}) \exp(ik_{1z}z) + pS(k_{2z}) \exp(ik_{2z}z). \end{aligned}$$

В этих выражениях проекции продольной и сдвиговой составляющих волнового вектора падающей волны на сопутствующие оси координат x и z

$$\begin{aligned} k_{1x}(\theta) &= k_r \cos\theta + i\sqrt{k_r^2 - k_t^2} \sin\theta, & k_{2x}(\theta) &= k_r \sin\theta + i\sqrt{k_r^2 - k_t^2} \cos\theta, \\ k_{1z}(\theta) &= k_r \cos\theta + i\sqrt{k_r^2 - k_t^2} \sin\theta, & k_{2z}(\theta) &= k_r \sin\theta + i\sqrt{k_r^2 - k_t^2} \cos\theta, \end{aligned} \quad (11)$$

выражаются в комплексном виде, где действительная часть определяет скорость волны, а мнимая – амплитуду колебаний.

Волновое поле в этой задаче описывается формулами:

$$\Phi = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \Phi^*(k) e^{-ikx} dk, \quad \psi = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(k) e^{-ikz} dk. \quad (12)$$

Применяя к системе (3), (4) преобразование Фурье по x , получим:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Phi^*}{dz^2} + (k_t^2 - k^2)\Phi^* &= 0, & \frac{d^2\psi^*}{dz^2} + (k_t^2 - k^2)\psi^* &= 0, \\ 2kqi\Phi^* - k^2\psi^* - s^2\psi^* &= \left[\frac{P(k_{1x})}{k - k_{1x}} + p \frac{Q(k_{2x})}{k - k_{2x}} \right] \cos(\theta) + \left[\frac{R(k_{1z})}{k - k_{1z}} + p \frac{S(k_{2z})}{k - k_{2z}} \right] \sin(\theta), \\ \left(k^2 - \frac{k_t^2}{2} \right) \Phi^* + ksi\psi^* &= \left[\frac{R(k_{1x})}{k - k_{1x}} + p \frac{S(k_{2x})}{k - k_{2x}} \right] \cos(\theta) + \left[\frac{P(k_{1z})}{k - k_{1z}} + p \frac{Q(k_{2z})}{k - k_{2z}} \right] \sin(\theta), \end{aligned} \quad (13)$$

где спектральные плотности потенциалов определяются в виде:

$$\Phi^*(k, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(k, x) e^{ikx} dx, \quad \psi^*(k, z) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(k, x) e^{ikx} dx.$$

Применение обратного преобразования Фурье, дает соотношения, связывающие комплексные амплитуды потенциалов с углом клина:

$$\begin{aligned} \Phi &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\left[\left(\frac{P(k_{1x})}{k - k_{1x}} - p \frac{Q(k_{1x})}{k - k_{2x}} \right) S(k_r) + \left(\frac{R(k_{1x})}{k - k_{1x}} - p \frac{S(k_{2x})}{k - k_{2x}} \right) Q(k_r) \right]}{4k^2 q s - (k^2 + s^2)^2} \cos(\theta) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\left[\left(\frac{P(k_{1z})}{k - k_{1z}} - p \frac{Q(k_{2z})}{k - k_{2z}} \right) S(k_r) + \left(\frac{R(k_{1z})}{k - k_{1z}} - p \frac{S(k_{2z})}{k - k_{2z}} \right) Q(k_r) \right]}{4k^2 q s - (k^2 + s^2)^2} \sin(\theta) \right\} \exp(qz) dk, \quad (14) \\ \psi &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{\left[\left(\frac{P(k_{1x})}{k - k_{1x}} - p \frac{Q(k_{1x})}{k - k_{2x}} \right) R(k_r) + \left(\frac{R(k_{1x})}{k - k_{1x}} - p \frac{S(k_{2x})}{k - k_{2x}} \right) P(k_r) \right]}{4k^2 q s - (k^2 + s^2)^2} \cos(\theta) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\left[\left(\frac{P(k_{1z})}{k - k_{1z}} - p \frac{Q(k_{2z})}{k - k_{2z}} \right) R(k_r) + \left(\frac{R(k_{1z})}{k - k_{1z}} - p \frac{S(k_{2z})}{k - k_{2z}} \right) P(k_r) \right]}{4k^2 q s - (k^2 + s^2)^2} \sin(\theta) \right\} \exp(sz) dk. \end{aligned}$$

Полученные выражения дают богатую количественную и качественную информацию о структуре дифрагированного поля. Гармоники с $k = k_r$ описывают поле рэлеевских волн, с $k < k_r$ – поле объемных волн и с $k_r > k > k_t$ – поле поверхностных волн с сильнозатухающими по направлению движения волны амплитудами смещений. Полное акустическое поле представляет сумму падающей и дифрагированных волн. Полученные выражения справедливы для углов $\theta > \theta_0$, поскольку при $\theta < \theta_0$, как было замечено выше, имеет место вырождение задачи.

Интегралы вида (14) часто возникают в задачах дифракции и вычисляются в явном виде.

3. Излучение объемных волн

Применение метода перевала к интегральному представлению решения приводит к формулам для диаграмм направленности расходящихся объемных волн [5]. Заметим, что излучатель не формирует поле уходящих объемных волн, когда угловое положение плоскости меньше параметра просачивания. Окончательные выражения для смещений сдвиговых и продольных волн в силу их громоздкости не приводятся. На рис. 1, 2 показаны распределения по азимутальным углам γ амплитуд продольной и поперечной волн соответственно (кривые 1–4 относятся к углам θ равным $30^\circ, 40^\circ, 60^\circ, 80^\circ$ соответственно). Сравнительный анализ кривых, представленных на этих рисунках, показывает, что при углах γ , близких к θ_0 , наблюдается высокий уровень амплитуд смещений. При уменьшении угла клина происходят как изменение амплитуды смещений волны, так и небольшое смещение максимума угловой зависимости амплитуды от угла γ .

Для понимания физических факторов, определяющих поведение волн как функции углового расположения наклонной плоскости, рассмотрим более подробно характерный случай: падение рэлеевской волны на плоскость, составляющей с поверхностью прямой угол. Угол θ является вещественным, что придает вычисляемым параметрам структуры волн реально наблюдаемые величины, и позволяет лучше понять свойства рэлеевской волны. В этом примере возникает очень интересный эффект, который в рамках известных представлений объяснить не представляется

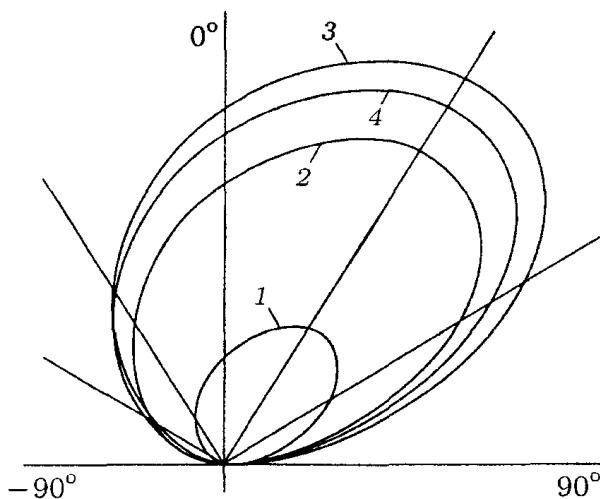


Рис. 1. Азимутальное распределение амплитуд продольных волн

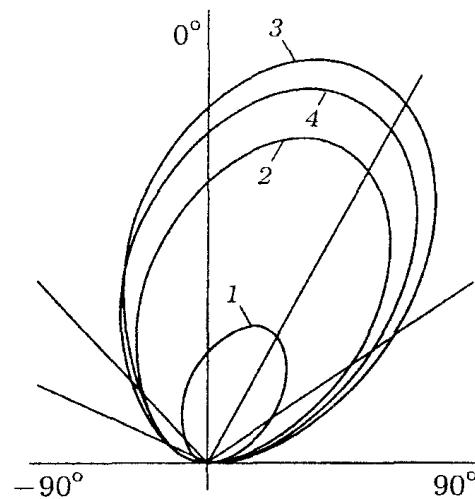


Рис. 2. Азимутальное распределение амплитуд поперечных волн

возможным. Волна падает на плоскость по нормали, а отражение максимальной амплитуды объемной волны происходит под углом примерно θ_0 (рис. 3). В классическом случае при отражении волн амплитуда волновых возмущений на границе сред неизменна, что приводит к выполнению закона Снеллиуса. В данном случае амплитуда источника вторичных волн по мере движения убывает, что отражается на характере изменения амплитуд фурье-гармоник, формирующих объемные волны. С изменением угла θ изменяется характер поведения амплитуд фурье-гармоник, и происходит угловое смещение максимума амплитуды. Как известно, распространение упругих волн связано с движением энергии колебаний в деформируемой среде. Векторы лучевых скоростей (потоков энергии) при волноводном распространении связаны с направлением движения волны.

С физической точки зрения векторы плотностей потоков энергии определяют направления движения фронтов волн. В рэлеевской волне лучевая скорость направлена вдоль границы среды, а фазовая определяется направлением нормали к фронту волны, которая составляет угол θ_0 . К этому выводу можно прийти, если рассмотреть огибающую рэлеевской волны (рис. 4.). Движения частиц среды в этой волне происходят по эллипсам, с экспоненциально убывающими с глубиной амплитудами колебаний. С помощью простых расчетов, нетрудно убедиться, что направление движения волны составляет угол θ_0 с нормалью к ее фронту.

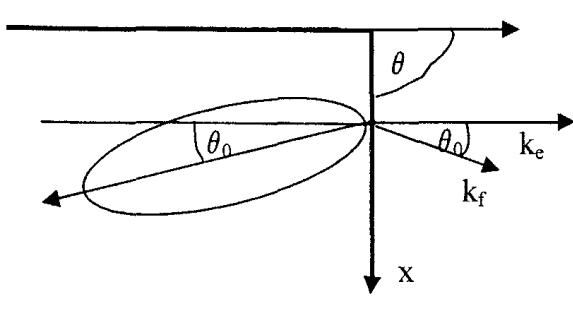


Рис. 3. Картина поля сдвиговой волны для $\theta = 90^\circ$

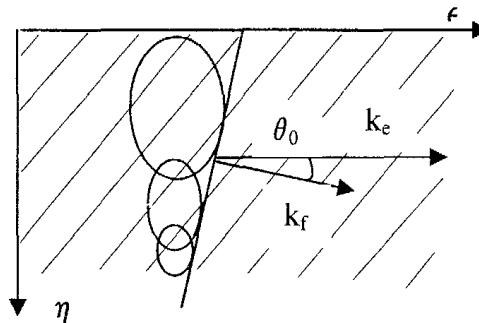


Рис. 4. Фронт волны Рэлея

4. Определение поля рэлеевских волн

Вычеты в полюсах подынтегрального выражения дают рэлеевские волны, распространяющиеся вдоль поверхности плоскости [6]. Структура решения, в основном, определяется физическими представлениями. Из сказанного выше следует, что решение задачи надо находить для не-

стр. 127 в печатной версии Вестника отсутствует

Следовательно, отраженная волна, сформированная на плоскости, проходит в обратном направлении через излом на поверхность, в которой амплитуда волн определится выражением:

$$R_1(\theta) = R(\theta)V(\theta).$$

5. Заключение

В данном сообщении мы подробно рассмотрели физические аспекты возникновения поля поверхностных и объемных волн, вызываемые неоднородной волной. Однако полученные формулы, правильно описывая это явление, содержат и другую полезную информацию. Полученные формулы определяют не только качественные особенности дифрагированного поля, но и осуществляют количественные уточнения распределения амплитуд поля. Точная количественная информация здесь очень важна, поскольку направление максимума поля дифрагированных объемных волн определяется волновым вектором фазовой скорости поверхностной волны, зависящей от упругих свойств среды.

Литература

1. Knopoff L., Gangi A. // Geophysics. –1960. – V. 25. – P. 1203.
2. Викторов И.А. Физические основы применения ультразвуковых волн Рэлея и Лэмба в технике.– М.: Наука, 1966. – 165с.
3. Бреховских Л.М., Гончаров В.В. Введение в механику сплошных сред. – М.: Наука, 1982. – 335 с.
4. Работнов Ю.Н. Механика деформируемого твердого тела. – М.: Наука, 1988. – 712с.
5. Толипов Х.Б., Гуревич С.Ю. Особенности дифракции поверхностных волн на ребре клина // ПМТФ. – 2003. – №5. – С.161–168.
6. Толипов Х.Б. Дифракция поверхностной волны на ребре клина// Дефектоскопия. – 2002. – №7. – С.21–27.

Поступила в редакцию 24 февраля 2005 г.

стр. 129 в печатной версии Вестника отсутствует

Решение уравнения (2) есть

$$\Phi = (A_0 \operatorname{ch} \nu_1 \theta + C_0 \operatorname{sh} \nu_1 \theta) \exp[i(pz - \omega t)]; \quad (4)$$

$$\psi_2 = (A_2 \operatorname{ch} \nu_2 \theta + C_2 \operatorname{sh} \nu_2 \theta) \exp[i(pz - \omega t)],$$

с обозначениями: $\nu_1 = \sqrt{p^2 - k_\ell^2} r$, $\nu_2 = \sqrt{p^2 - k_t^2} r$, p – волновое число кромочной волны, ν_1 и ν_2 – угловые волновые числа, i – мнимая единица. В дальнейших выкладках множитель $\exp(-i\omega t)$ опускается.

Если распределение потенциалов задается функциями (4), то упомянутые выше граничные условия приводят к алгебраической системе четырех однородных уравнений для нахождения амплитуд A_0, A_2, C_0, C_2 . Условием существования нетривиальных решений этой системы уравнений является равенство нулю ее главного определителя, который представим в виде произведения $\Delta_s \cdot \Delta_{as}$. Эта система имеет решения при двух независимых условиях: $\Delta_s = 0$ и $\Delta_{as} = 0$, где элементы определителей $\Delta_s = |a_{gk}|$ и $\Delta_{as} = |b_{gk}|$ ($g, k = 1, 2$) имеют вид:

$$\begin{aligned} a_{11} &= b_{11} \operatorname{cth} \nu_1 \theta_0 = (p^2 - 0,5k_\ell^2) \operatorname{ch} \nu_1 \theta_0; \\ a_{12} &= b_{12} \operatorname{cth} \nu_2 \theta_0 = \frac{2\nu_1 p}{r} i \operatorname{sh} \nu_2 \theta_0; \\ a_{21} &= b_{21} \operatorname{cth} \nu_2 \theta_0 = \frac{\nu_2^2}{r^2} pi \operatorname{ch} \nu_2 \theta_0; \\ a_{22} &= b_{22} \operatorname{cth} \nu_2 \theta_0 = -\frac{\nu_2}{r} (p^2 + \frac{\nu_2^2}{r^2}) \operatorname{sh} \nu_2 \theta_0. \end{aligned} \quad (5)$$

Определители позволяют получить решения для поставленной задачи:

Решение 1:

$$U_z = A_0 ip \operatorname{ch} \nu_1 \theta - C_2 \frac{\nu_2}{r^2} \operatorname{ch} \nu_2 \theta; \quad (6)$$

$$U_\theta = A_0 \frac{\nu_1}{r} \operatorname{sh} \nu_1 \theta + C_2 ip \frac{\nu_2}{r} \operatorname{sh} \nu_2 \theta.$$

Решение 2:

$$U_z = C_0 ip \operatorname{sh} \nu_1 \theta - A_2 \frac{\nu_2}{r^2} \operatorname{sh} \nu_2 \theta; \quad (7)$$

$$U_\theta = C_0 \frac{\nu_1}{r} \operatorname{ch} \nu_1 \theta + A_2 ip \frac{\nu_2}{r} \operatorname{ch} \nu_2 \theta.$$

Следует также отметить, что смещения частиц в решении 1 симметричны относительно плоскости, проходящей через биссектрису угла клина, в другом решении – антисимметричны относительно той же плоскости.

Полученный определитель можно записать в компактном виде:

$$\frac{(p^2 + \beta^2)^2}{4\alpha\beta p^2} - \left[\frac{\operatorname{th} \beta r \theta}{\operatorname{th} \alpha r \theta} \right]^m = 0, \quad (8)$$

где $\alpha = \sqrt{p^2 - k_\ell^2}$, $\beta = \sqrt{p^2 - k_t^2}$, $m = 1$ – для антисимметричных волн, $m = -1$ – для симметричных волн.

Таким образом, получено решение системы уравнений, удовлетворяющее граничным условиям и уравнениям движения.

Определим характер изменения пространственной структуры поля по переменной r . Уравнения движения в этой постановке задачи принимают вид:

$$\Delta \Phi + k_\ell^2 \Phi = 0, \quad \Delta \psi_1 + k_t^2 \psi_1 = 0, \quad (9)$$

$$\text{где } \Delta = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \theta^2};$$

граничные условия при $\theta = \pm \theta_0$:

$$\sigma_{r\theta} = \sigma_{\theta\theta} = 0, \quad (10)$$

$$\text{где } \sigma_{r\theta} = \rho c_t^2 \left(\frac{2}{r} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r \partial \theta} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial \Phi}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi_1}{\partial \theta^2} \right);$$

$$\sigma_{\theta\theta} = 2\rho c_t^2 \left[-\frac{k_t^2}{2} \Phi - \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} - \frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial \psi_1}{\partial \theta} \right) \right], \quad \rho - \text{плотность среды.}$$

В [5] получено приближенное решение этой системы уравнений, что позволило выписать асимптотическое приближенное полученное решение в явном виде и проанализировать свойства волновой компоненты поля.

Из анализа решения этой задачи выяснено, что продольная составляющая поверхностной волны, направленная к ребру клина, не доходит до ребра. Вблизи кромки клина происходит наложение падающей и отраженной волн, сопровождающееся возникновением пульсирующего поля. Существенным является то, что в данном направлении энергия акустической волны не переносится.

Кромочная поверхностная волна локализуется у границы этой пробки (области, в которой отсутствуют продольные колебания), т.к. продольная составляющая поверхностной волны не пропустит эту волну к ребру. Протяженность этой пробки с увеличением угла клина изменяется, и траектория волны будет удаляться от ребра клина. При этом увеличивается локальная толщина клина (т.е. толщина клина в области траектории волны), что ведет к возрастанию скорости волны. Важно отметить, что эта область не исчезает при уменьшении угла клина до нуля.

На рис. 1 для момента времени, соответствующего максимуму колебаний стоячей волны, представлены зависимости амплитуды смещений в волнах от расстояния до ребра клина для углов клина $\alpha_1=5,7^\circ$ (сплошная линия) и $\alpha_2=2,9^\circ$ (пунктирная линия), где U_r – амплитуда смещений в релеевской волне, а штрих-пунктиром отмечена область пробки.

Структура волнового поля существенно зависит от координаты источника возбуждения. Вблизи границы пробки вследствие рефракции пространственная структура волнового поля имеет форму полусинусоиды [6]. Возбуждение частиц среды вдали от ребра клина приводит к увеличению числа осцилляций и скорости волны. Ширина волнового канала определяется количеством этих осцилляций. Отметим также, что максимумы амплитуд смещений в стоячей волне с увеличением угла клина отодвигаются от его ребра.

Скорости мод кромочных волн определяются подстановкой в (8) значений переменных r_k (рис. 2, 3), соответствующих координатам источника возбуждения волн. Решения уравнения (8) в окрестности ребра будут представлять дискретный спектр поля.

Отметим, что в данной постановке задачи при $k_t r \theta \gg 1$ второе слагаемое в (8) стремится к единице, и соотношение переходит в стандартное уравнение Рэлея. Физический смысл этого решения достаточно очевиден: на дальних расстояниях от ребра стоячая волна эволюционирует в две волны, бегущие по разным граням. Решения дисперсионного уравнения при этих значениях переменных $r\theta$ образуют непрерывный спектр поля.

Таким образом, анализ решения позволяет выделить две характерные области. Вдали от ребра решение задачи приводит к уравнению Рэлея. В области $r\theta < \lambda$ решение уравнений приобретает дискретный характер.

На рис. 4 представлены сплошными линиями теоретические зависимости скорости второй и шестой мод кромочных волн от угла клина (c_r – скорость релеевской волны), пунктирными линиями обозначены экспериментальные кривые из [1].

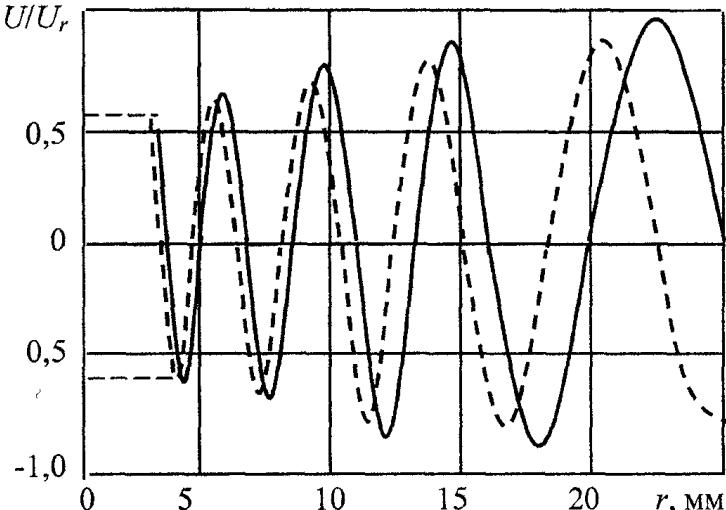


Рис. 1. Структура смещений в стоячей волне вблизи ребра

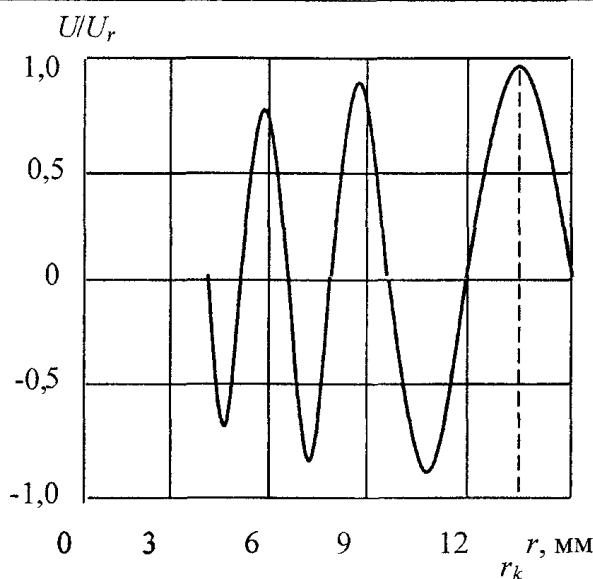


Рис. 2. Характер изменения амплитуды смещений в шестой волноводной моде от пространственной координаты

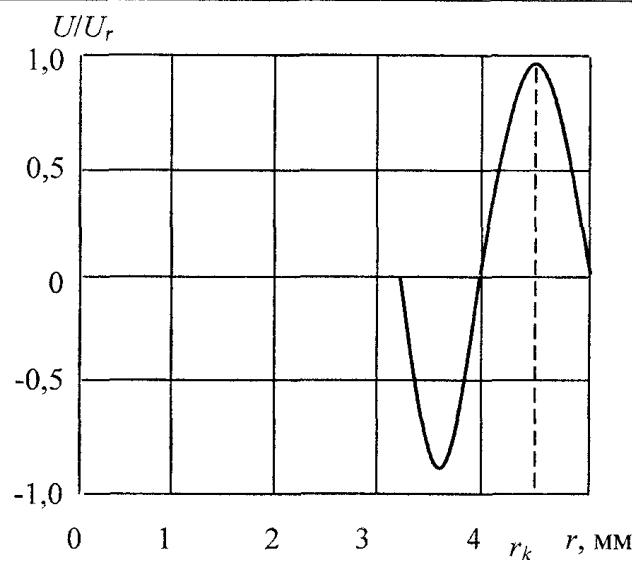


Рис. 3. Характер изменения амплитуды смещений во второй волноводной моде от пространственной координаты

Анализ результатов показал, что число мод антисимметричных волн в клине при определенном угле ограничено. Ширина волнового канала растет с уменьшением угла клина и с возрастанием номера моды. Увеличение угла клина ведет к сужению ширины каналов, и при больших углах ($\theta > 90^\circ$) эти каналы практически сливаются между собой. Этим объясняется отсутствие при этих углах клина экспериментальных кривых скоростей кромочной волны.

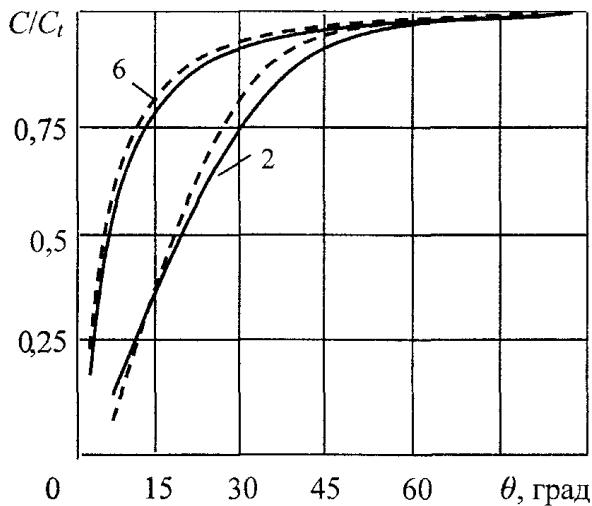


Рис. 4. Зависимости скорости шестой и второй волноводных мод от угла клина

Полученное решение позволяет рассчитать волновое поле вблизи окрестности ребра. Технически при возбуждении колебаний возникают два вида движений: по направлению к ребру клина и существующее только в начальный период времени до образования отраженной стоячей волны, и антисимметричное движение вдоль ребра. Закономерности пространственного изменения структуры поля при удалении от ребра существенно зависят от угла клина.

Симметричные волны являются неустойчивыми в волновом канале, так как вследствие рефракции они будут отклоняться от ребра клина.

В заключение можно отметить, что удовлетворительное совпадение картины поля, возникающей в окрестности ребра с приводимыми расчетами, говорит о правомерности предложенной математической модели, объясняющей волноводный характер распространения волны.

Литература

1. Moss S.L., Maradudin A.A., Cunningham S.L. – Phys. Rev. B. – 1973. – V.8. – P. 2999.
2. Sharon T. M., Maradudin A.A., Cunningham S.L. – Phys. Rev. B. – 1973. – V.8. – P. 6024.
3. Lagasse P.E., Mason I.M. – Electron. Lettr. – 1972. – V.8. – P. 82.
4. Lagasse P.E. – IEEE Trans. Son. Ultrason. 1973. – V.20. – P. 354.
5. Толипов Х.Б. Двумерная задача распространения акустических колебаний в клине// ММ. – 2003. – Т.15. – №10. – С. 105–108.
6. Kh. B. Tolipov, S. Yu. Gurevich. Waveguide properties of the acute wedge plate – eleventh international congress on sound and vibration // 5–8 July 2004, St. Petersburg, Russia.

Поступила в редакцию 24 февраля 2005 г.

ИНФРАНИЗКОЧАСТОТНЫЕ ФЛУКТУАЦИИ ПРОВОДИМОСТИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЕНОК Со и Ag

А.А. Шульгинов, Н.С. Забейворота

Проведены исследования флуктуаций проводимости пленок кобальта и серебра. Главное отличие инфразиокчастотных флуктуаций проводимости кобальта и серебра в длительности скачков. У кобальта эта величина составляет 1–10 с, а у серебра 0,5–30 мин. Корреляционный анализ флуктуаций проводимости и индексов геомагнитной активности показал отсутствие взаимосвязи этих явлений.

Введение

Проводимость тонких металлических пленок подвержена флуктуациям разных временных масштабов, обусловленных внутренними и внешними причинами. На частотах выше ~10 Гц при комнатной температуре доминируют тепловые шумы. В диапазоне ниже 10 Гц преобладает фликкер-шум, обусловленный, например, рассеянием электронов на дефектах (вакансийный механизм) [1, 2]. В настоящее время продолжаются исследования низкочастотных шумов проводимости металлов, полупроводников и контактов между ними [3]. Однако эти исследования ограничиваются частотным диапазоном не ниже 1 Гц, где наблюдается стационарный фликкер-шум. Цель нашей работы состояла в том, чтобы исследовать закономерности флуктуаций проводимости металлических пленок в инфразиокчастотной области (ниже 0,01 Гц). Возможно, что именно эти флуктуации приводят к разрушению тонкопленочных резисторов в микросхемах.

Следует отметить работы группы исследователей под руководством профессора Р. Нельсона директора GCP (Global Consciousness Project) [4]. Они проводят регистрацию редких всплесков в 37 генераторах случайных чисел, размещенных в разных странах. В моменты наступления крупных мировых событий эти генераторы дают статистически достоверные всплески. Это указывает на то, что инфразиокчастотные нестационарные шумы в системе могут быть вызваны явлениями, происходящими в ноосфере Земли.

С.Э. Шноль с сотрудниками более 40 лет исследовали особенности биохимических реакций и скорости радиоактивного распада [5]. Оказалось, что в процессах различной природы происходят изменения с периодами 24 ч, 27 суток и около 365 суток. Это свидетельствует об общей геокосмической основе феномена.

А.Г. Пархомов исследовал ритмы и флуктуации в ходе различных процессов (низкочастотный шум проводимости полупроводниковых приборов, генерация колебаний устройствами с кварцевыми резонаторами, альфа- и бета-распад) [6, 7]. В этих процессах также обнаружились годичные, месячные и суточные ритмы. Длительность рядов составила до 4 лет. Аналогичные результаты получили В.П. Измайлов с сотрудниками по измерению постоянной гравитации в течение 12 лет [8].

Таким образом, инфразиокчастотные флуктуации в различных процессах могут нести информацию о глобальных внешних воздействиях на систему. Тонкие металлические пленки были выбраны для регистрации таких воздействий, поскольку имеются возможности создать пленку любого состава, толщины и качества. В рамках данной работы были поставлены два вопроса: во-первых, существуют ли особенности инфразиокчастотных флуктуаций у пленок разного состава и качества поверхности? Во-вторых, существует ли корреляция между флуктуациями проводимости и флуктуациями земного магнитного поля? Впервые успешную попытку применить металлические пленки как детекторы полей сделал астрофизик Н.А. Козырев [9]. Такой детектор был помещен в фокус телескопа-рефлектора при закрытой крышке телескопа. Когда «изображение» звезды попадало на пленку, которая была встроена в мост Уитстона, сопротивление ее немного варьировалось в зависимости от ориентации телескопа.

Эксперимент

Для исследования флюктуаций проводимости была собрана установка, включающая в себя два компьютера, оснащенных платами сбора данных, контейнер с исследуемой пленкой, помещенный на дно шахты глубиной 2 м, и контейнер с аккумулятором. Глубина шахты достаточная, чтобы суточные температурные волны не достигали дна. Температура в шахте во время записи флюктуаций составляла 15,9 °С. Изменения температуры, а также изменения напряжения на аккумуляторе и на мосте Уитстона, в котором находилась пленка регистрировались круглосуточно первым компьютером. Температура в течение суток изменялась не более чем на 0,02 °С. Для защиты от электромагнитных помех стенки шахты и контейнер были сделаны из металлов (алюминий, медь). Флюктуации проводимости пленки определялись по флюктуациям потенциалов двух платиновых электродов, поставленных на пленку. Потенциалы усиливались с помощью инструментальных усилителей с низким уровнем шумов (AD623). Перед началом экспериментов были измерены собственные шумы моста и усилительного тракта, который также находился в контейнере с пленкой. В диапазоне частот 0,001–0,01 Гц эти шумы были в 10–15 раз меньше, чем в схеме с пленкой. Регистрация флюктуаций производилась вторым компьютером круглосуточно с частотой 1 кГц по каждому каналу. После усреднения данные записывались с частотой 2 Гц. Таким образом, установка регистрировала флюктуации проводимости металлических пленок и контактов. Отделить одни флюктуации от других не представляется возможным в условиях данного эксперимента. В качестве объектов исследования были выбраны ферромагнитная пленка кобальта толщиной 0,22 мкм и диамагнитная пленка серебра толщиной 0,19 мкм, нанесенные на подложки из поликорда ионно-плазменным методом. Сопротивления пленок были примерно одинаковые около 10 Ом. Напряжение моста устанавливалось около 22 мВ. Плотность тока в пленке составляла около 10 А/см², что на 5 порядков ниже порога, при достижении которого существенную роль начинают играть тепловые явления [1]. Платиновые электроды устанавливались на расстояниях от 1 до 16 мм на эквипотенциальной линии, либо на линии тока. Минимальные регистрируемые флюктуации потенциалов электродов ~0,3 мкВ, что соответствует относительной флюктуации проводимости пленки ~3·10⁻⁵.

Результаты

Зарегистрированы инфразвуковые флюктуации проводимости этих пленок: скачки (рис. 1) и всплески (рис. 2, 3, 4).

Определены основные характеристики этих флюктуаций:

1. Флюктуации носят непериодический характер и не связаны со временем суток. Количество всплесков и скачков в сутки у кобальта – 0–3, у серебра – 2–12.

2. Главное отличие флюктуаций проводимости кобальта и серебра в длительности скачков. У кобальта эта величина составляет 1–10 с, а у серебра 0,5–30 мин. Средние относительные флюктуации проводимости составляли ~10⁻³–10⁻².

3. Спектральный анализ мощности флюктуаций показал количественное, но не качественное различие спектра для кобальта и серебра (рис. 5). Средняя мощность фликкер-шума проводимости серебра примерно в 100 раз выше, чем у кобальта.

4. Совместный анализ флюктуаций проводимости пленок и индексов геомагнитной активности A_p показал, что геомагнитная активность и мощность флюктуаций проводимости в диапазоне частот 0,001–0,01 Гц как кобальта, так и серебра имеют коэффициенты корреляции менее 0,2, т.е. статистически достоверной корреляции между этими явлениями не отмечено. Эксперименты с пленкой кобальта проводились с 27 ноября по 14 декабря 2004 года. В этот период произошла магнитная буря 12 декабря (6 баллов). Наибольшее количество всплесков отмечено 4 декабря с 2.30 до 3.00 УТ. Эксперименты с пленкой серебра проводились с 16 по 28 декабря 2004 года. Усиление геомагнитной активности в этот период до 5 баллов наблюдалось 16 декабря. Наибольшее количество всплесков отмечено 19 декабря. Данные о геомагнитной активности получены из ИЗМИРАНа [10].

Принципиально новым в полученных результатах является то, что выявлены особенности нестационарных редких флюктуаций проводимости металлических пленок кобальта и серебра.

Выяснилось, что геомагнитные явления не являются причиной этих флуктуаций ни у ферромагнитной пленки кобальта, ни у диамагнитной пленки серебра.

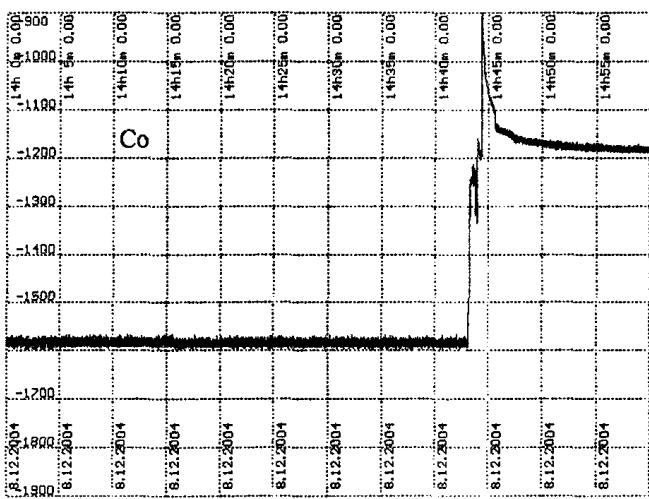


Рис. 1. Скачок проводимости кобальта

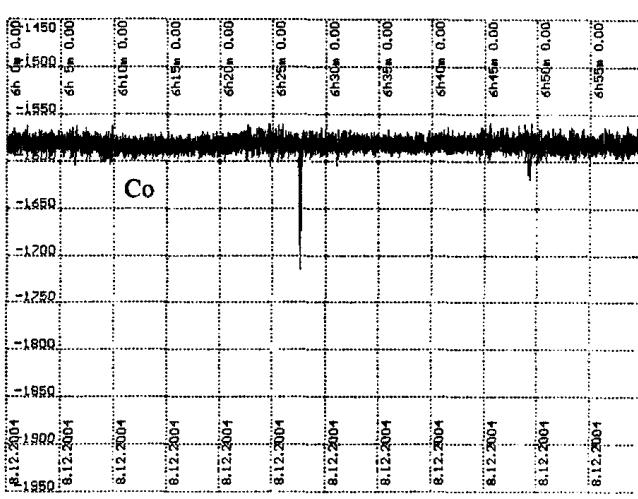


Рис. 2. Всплеск проводимости кобальта

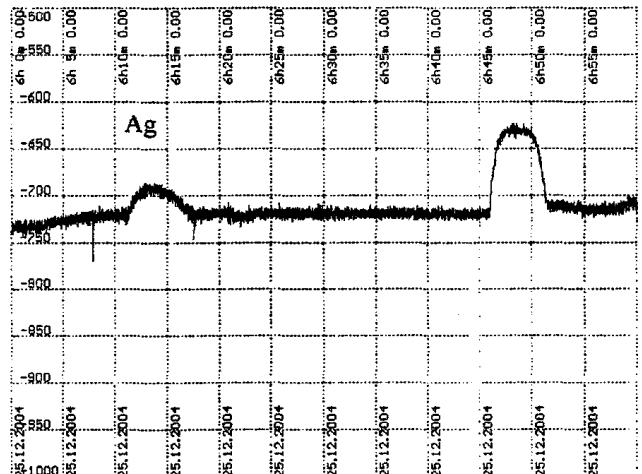


Рис. 3. Всплеск проводимости серебра (1)

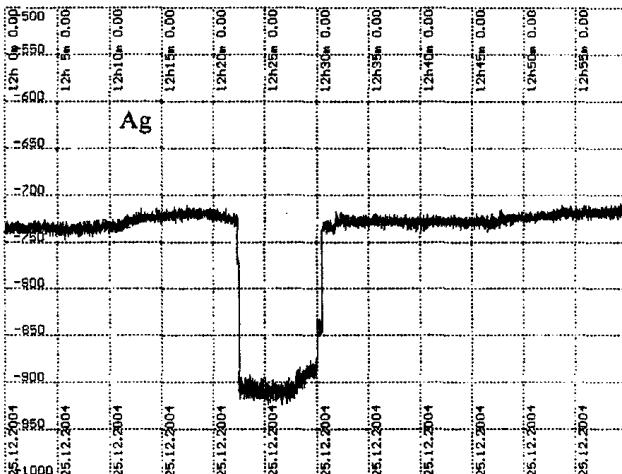


Рис. 4. Всплеск проводимости серебра (2)

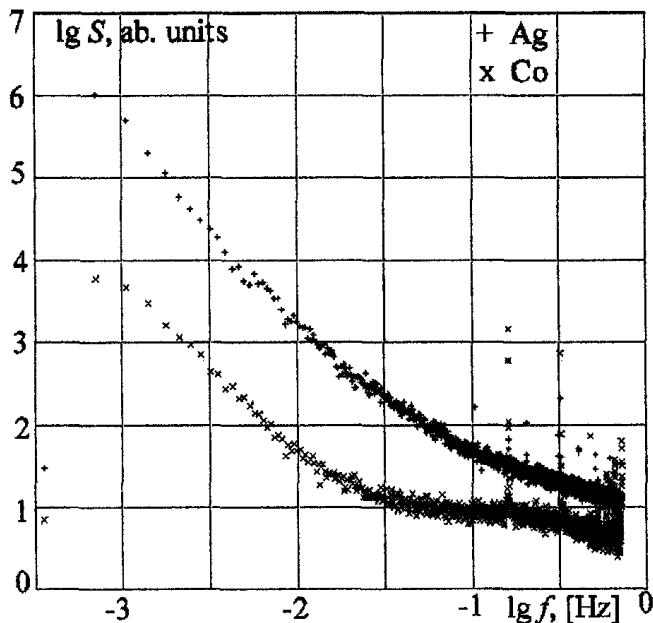


Рис. 5. Спектральная мощность флуктуаций проводимости кобальта и серебра

Авторы выражают глубокую благодарность Ю.В. Петрову, О.В. Карасёву, В.Г. Русину и С.Ю. Гуревичу за помощь в подготовке эксперимента.

Работа выполнена при поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований и Администрации Челябинской области (проект № 04-02-96045).

Литература

1. Жигальский Г.П. Шум вида $1/f$ и нелинейные эффекты в тонких металлических пленках// УФН. – 1997. – Т. 167. – № 6. – С. 623–648.
2. Жигальский Г.П. Неравновесный $1/f$ -шум в проводящих пленках и контактах// УФН. – 2003. – Т. 173. – № 5. – С. 465–490.
3. Park W.K., et. al. Noise Properties of Magnetic and nonmagnetic tunnel junctions // J.Appl Phys. – 2003. – V. 93. – P. 7020–7022.
4. <http://noosphere.princeton.edu/terror.html>
5. Шноль С.Э., Коломбет В.А., Пожарский Э.В., Зенченко Т.А., Зверева И.М., Конрадов А.А. О реализации дискретных состояний в ходе флюктуаций в макроскопических процессах //УФН. – 1998. – Т. 168, № 10. – С. 1129–1140.
6. Пархомов А.Г. Вариации интенсивности низкочастотных флюктуаций в полупроводниках // Атлас временных вариаций природных, антропогенных и социальных процессов. – М.: Научный мир, 1998. –Т. 2.– С. 310–312.
7. Пархомов А.Г. Исследование неслучайных вариаций результатов измерения радиоактивности// Атлас временных вариаций природных, антропогенных и социальных процессов. – М.: Янус-К, 2002.– Т. 3. – С. 607–612.
8. Измайлова В.П., Карагиоз О.В. Пархомов А.Г. Вариации результатов измерений гравитационной постоянной// Атлас временных вариаций природных, антропогенных и социальных процессов. – М.: Научный мир, 1998. – Т. 2.– С. 163–168.
9. Козырев Н.А. Избранные труды. – Л.: Изд. Лен. университета, 1991. – 448 с.
10. <http://www.izmiran.rssi.ru>

Поступила в редакцию 28 февраля 2005 г.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ АНТИОКСИДАНТОВ В СОСТАВЕ МАГНЕЗИАЛЬНЫХ УГЛЕРОДСОДЕРЖАЩИХ ОГНЕУПОРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Т.В. Варламова, Г.А. Лысова, С.И. Боровик

Модификация периклазоуглеродистых огнеупоров антиоксидантами является одним из способов повышения их износостойчивости. Рассмотрено влияние добавок на основе алюминия, магния, кремния и других составов на свойства данных материалов.

Одним из перспективных направлений в развитии производства огнеупорных изделий является разработка углеродсодержащих материалов. Технология периклазоуглеродистых огнеупоров, разработанная в 80-е годы XX в. в Японии, обеспечила высокий уровень развития металлургии [1]. Было найдено уникальное сочетание свойств: высокая устойчивость периклаза по отношению к железосиликатным шлакам, не менее высокая устойчивость графита ($T_{пл} = 3800^{\circ}\text{C}$) в определенных условиях к этим же шлакам, связующий материал – специальные углеродные связки на основе фенолформальдегидных и фурановых смол, лигносульфонатов, пека и т.д. Периклаз и углерод не образует эвтектических смесей, что позволяет предполагать высокую огнестойкость [2]. Углерод обладает повышенной теплопроводностью при низком термическом расширении, что обеспечивает высокую термостойкость огнеупоров. Малая смачиваемость углерода металлом и шлаком и способность восстанавливать оксиды железа, повышая при этом вязкость и температуру плавления, предотвращает проникновение шлака вглубь огнеупоров. В последние годы производят углеродсодержащие огнеупоры, имеющие в составе наряду с оксидом магния оксид кальция и алюминия.

Однако периклаз и углерод при высокой температуре, в частности – в условиях конвертерного процесса являются термодинамически несовместимыми [3]. В результате их взаимодействия происходит окисление углерода и разрыхление структуры материала. Углеродные соединения огнеупоров взаимодействуют также с кислородом шлаков, металла, других возгоняющихся оксидов. Разрыхление структуры огнеупоров приводит к резкому уменьшению их износостойчивости [4]. Интенсивность окисления углеродных соединений – один из основных показателей, определяющих качество огнеупоров.

Важным направлением повышения эксплуатационных свойств данных материалов является стабилизация углерода, т.е. предотвращение выхода окисленного углерода из огнеупоров в процессе их службы [4, 5]. Процессы науглероживания и стабилизации углерода огнеупоров определяются в первую очередь технологическими параметрами, затем условиями службы огнеупоров.

Согласно [4], предотвращения окисления углеродсодержащих огнеупоров достигается следующими методами: химическим, структурным, физическим, атмосферным. Химический метод основан на применении углеродных соединений, окисляющихся в наименьшей степени, применении ингибирующих связок, комплексных антиоксидантов, препятствующих окислению соединений металлов.

Настоящий обзор посвящен рассмотрению одного из способов стабилизации углерода – применению антиоксидантов в технологии изготовления углеродсодержащих огнеупоров.

В качестве антиоксидантов применяют материалы, имеющие более высокое сродство к кислороду в условиях службы, нежели углерод. В работах [2, 20] отмечено, что роль данных добавок сводится только к участию в процессах, понижающих парциальное давление кислорода, но также к участию в фазообразовании на поверхности, обеспечивающему условия формирования новых структур с повышенными прочностными и коррозионными характеристиками. К таким

добавкам относятся в первую очередь легкоокисляющиеся металлы (алюминий, магний и т.д.) и двух-, трехкомпонентные сплавы либо их бескислородные соединения (карбиды, бориды и т.д.) [24]. В [32] отмечено, что такой метод эффективен для поверхности изделий, контактирующих с металлом и/или шлаком. При более низких температурах для нерабочей поверхности изделий метод неэффективен.

Наиболее распространёнными антиоксидантами являются металлические алюминий и магний, либо их сплавы и составы на их основе. Об их использовании в качестве компонентов огнеупорных изделий и изучении влияния на окислительную способность, прочностные и коррозионные характеристики сообщается в работах [6, 7, 8, 21–29, 31–37, 39].

К 1983 г. доля периклазоуглеродистых огнеупоров в общем производстве конвертерных изделий японской фирмы «Курасаки ёё» составила 70 % [7] и распространённым способом повышения качества таких изделий является введение добавок металлов, в частности алюминия. Алюминий в процессе службы огнеупора образует карбид алюминия Al_4Cl_3 , который распределяется по границам графитовых чешуек в виде белых кольцеобразных частиц, усиливая связь между огнеупорными зёренами и повышая прочность огнеупоров, а также предотвращая окисление графита за счет большего сродства к кислороду [7, 24].

По данным [7, 24] в лабораторных условиях исследовалось влияние различных количеств добавок Al–Mg (обеспечивалось различное количество Mg при постоянном количестве Al) на свойства образцов, содержащих 20 % графита изначально и термообработанных при 1400 °C в течение двух часов. С увеличением количества добавок улучшаются механические свойства и устойчивость к окислению. Лучшие результаты демонстрировали образцы, содержащие сплав Al–Mg: максимальная прочность на изгиб составила 14,5 Н/мм², а устойчивость к окислению (как величина обратная толщине обезуглероженного слоя образцов с ребром 50 мм, термообработанных при 1400 °C в течение двух часов) – 0,7 мм⁻¹. Сравнительные испытания вышеуказанных образцов проводились статическим и динамическим методом в индукционной печи, с использованием 100 кг стали и 6 кг шлака (основность около 3, общее содержание железа 10 %) при температуре 1650 °C. Статические испытания длились около 10 часов с заменой шлака каждые 2 часа, динамические – 2 часа при вращении металла и шлака со скоростью 3 с⁻¹. Лучшие результаты в обоих случаях показали образцы с алюромагниевым сплавом (см. таблицу). При его введении снижается скорость окисления углерода оксидами железа шлака и повышается устойчивость к эрозии в результате упрочнения структуры огнеупоров.

Исследованиями в [34] установлено, что для получения MgO–С изделий с низким термическим расширением (обеспечивающим малое растрескивание футеровки в процессе службы) следует тонко измельчать алюминий и использовать связку с высоким остаточным содержанием углерода, обеспечивая тем самым предпочтительное образование карбида кремния в процессе службы огнеупора. При нагревании в среде азота коэффициент термического расширения MgO–С изделий имеет высокое значение ($2,5 \cdot 10^{-5}$ при 1200 °C), что, по мнению авторов, обусловлено образованием нитрида алюминия.

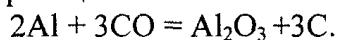
Влияние добавок на износостойчивость периклазоуглеродистого огнеупора

Добавка	Индекс износа	
	Статическим методом	Динамическим методом
Нет	100	100
Al	86	86
Сплав Al и Mg	76	50

Вместо сплава на основе магния фирма «Nipon Steel» использовала в качестве антиокислителя более дешевую добавку стекла и алюминия [24]. Химический состав стекла, %: SiO₂ – 45; Al₂O₃ – 13; CaO – 30; MgO – 12. Оптимальное соотношение стекла и алюминия в добавке 0,2–0,4. Опытные периклазоуглеродистые огнеупоры (78 % MgO и 18 % С) испытывали в футеровке стен (ниже верхнего конуса) 175 т конвертера LD-OB. Скорость износа уменьшилась на 10 % по сравнению с изделиями, содержащими только алюминий. Для огнеупоров, содержащих и алюминий, и магний этот показатель составил 13 %, однако они значительно дороже и нецелесообразны в кладках с малым износом.

В работе [6], и ранее в [24], отмечено, что эффективность алюминия в отдельности и в сочетании с кремнием зависит от участка футеровки и условий сталеплавильного процесса. В основ-

ном антиоксиданты вводят в связующее, что способствует их равномерному распределению в огнеупорах [6, 24] и, по-видимому, с учетом данных [34], способствует преимущественному образованию карбида алюминия в процессе службы огнеупоров. Здесь же приведены результаты зарубежных исследований: сравнительное изучение огнеупорных материалов с добавками порошкообразного алюминия и без него показывает, что скорость износа огнеупоров с 18 % содержанием графита и добавкой порошка Al в 1,2–1,3 раза меньше, по сравнению с образцами, не имеющими антиоксидантов, и составляет 1,3–2,0 мм за плавку. Снижение потери массы огнеупора в приповерхностном слое происходит за счет уменьшения выгорания углерода, благодаря химическому процессу, включающему реакцию:



Определено, что металлический Al взаимодействует с CaO, входящим в состав шлака с образованием легкоплавких соединений, что может снижать коррозионную стойкость огнеупорного материала. Установлена оптимальная величина добавки алюминия – 3–4 %.

Авторы [6] исследовали влияние антиокислительных добавок порошков металлического алюминия и кристаллического кремния на свойства периклазоуглеродистых и алюмопериклиазоуглеродистых огнеупоров, изготовленных с использованием в качестве связующего термореактивной смолы на основе резорцинового олигомера (РТОС). Порошки антиоксиданта предварительно вводили в связующее, затем добавляли в шихту. Состав шихты периклазоуглеродистых огнеупоров включал: порошки промышленного периклаза с определенным зерновым составом – 82,0–90,5 мас.%; чешуйчатый графит аттестованного состава – 7–15 мас.%; порошок алюминия (марки АСД, 10–15 мкм) – 2,5–3,0 %. Связующее добавляли в шихту сверх 100 % в количестве 7–10 %, исходя из необходимой величины предела прочности при сжатии. Образцы изготавливались методом полусухого прессования и подвергались термообработке в определённом режиме с выдержкой в течение 1 часа при 100 °C, 130 °C и максимально при 170 °C. Определяли среднюю плотность, открытую пористость и прочность на изгиб. Прочностные показатели полученных образцов лишь немного ниже тех же образцов, но без антиоксидантов (по мнению авторов, это связано с плохой смачиваемостью алюминия РТОС) и при этом являются достаточно высокими для обеспечения необходимых эксплуатационных свойств огнеупоров. Открытая пористость не превышала 10,9 %. Применение уротропина в составе изделия в качестве отвердителя повышало их керамические и механические характеристики. Алюмопериклиазоуглеродистые огнеупоры содержали 10 % графита, в них варьировался зерновой состав используемых бокситов, доля которых составила 80–81 %, периклаза – 9–10 %, алюминия – 2,4–3 %, кремния – 0–0,6 %, в связующее (7 % сверх 100 %) добавляли уротропин – 3 %. Открытая пористость не превышала 13,7 %, предел прочности на сжатие – 47,6–59,0 МПа (для образцов без уротропина – 40,3–49,0 МПа). Степень декарбонизации образцов огнеупоров определяли по относительной потере массы при нагревании со скоростью 3 °C/мин до 1200 °C и выдержкой 1 и 3 часа. Присутствие Al снижает для периклазоуглеродистых образцов данную величину в 1,3–1,5 раз. Петрографический анализ образцов, декарбонизированных в течение 1 часа, показал, что связующее проявляет как изотропные так и анизотропные свойства (5 % полимера) и кристаллизуется по поверхности зерен периклаза. Количество реакционно-активного кокса, образующегося в процессе полимеризации, – 7 % от общего количества пробы. Размер частиц полимера 1–2 мкм. Не обнаружен оксид алюминия, который, по мнению авторов, превращается полностью в карбид алюминия, локализованный по поверхности зерен периклаза и чешуйкам графита. После 3 часов термообработки при 1200 °C связующее не исчезает, претерпев фазовые превращения, распределяется по поверхности периклаза тонкой плёнкой, при этом хорошо видны частицы сформированного кокса. Интенсивного окисления графита не наблюдается, причем окисление менее интенсивно для алюмопериклиазоуглеродистых образцов, что авторы [6] связывают с их более сложным фракционным составом и, как следствие, более плотной упаковкой и лучшим распределением графита.

Влияние варьирования количества графита (10–16,4 мас.%) и алюминия (0–5,2 мас.%) в составе на механические свойства и микроструктуру магнезиальнографитовых огнеупоров изучали в работе [36]. При этом образцы подвергали термической обработке при температурах 1000, 1200, 1450 °C в среде аргона. Предел прочности на изгиб в зависимости от температуры обработки имел значения 4–16 ГПа.

В [25] также рассматривается влияние добавок алюминия, магния, кремния и их сплавов на свойства периклазоуглеродистых огнеупоров – экспериментально продемонстрировано повышение

ние термомеханических свойств таких огнеупоров, показана значимость распределения антиоксиданта в объеме наполнителя.

В [9] патентуется способ изготовления антиоксиданта, предусматривающий предварительное приготовление шихты, состоящей из оксидов алюминия и кремния, и углеродсодержащей компоненты. Далее шихта подвергается плавке в режиме восстановления. При низких затратах на получение антиоксидант эффективен при 600–1400 °С.

Формально не согласуются с [7, 19, 25] результаты исследования добавок порошков кремния и/или CaZrO_3 в шихту для изготовления MgO – C кирпичей, используемых при футеровке шлаковой линии 150 т ковша-печи [33]. Авторы публикации [33] считают, что данные добавки ухудшают коррозионную стойкость изделий и используют другие антиоксиданты.

В [8] сообщается о предварительной пассивации металлического алюминия перед введением его в шихту. В условиях службы огнеупора происходит уменьшение его открытой пористости, ввиду размещения в порах продуктов окисления алюминия – Al_2O_3 , Al_3O_4 , возможно $\text{Al}_4\text{O}_4\text{C}$, с дальнейшим образованием в изделии алюромагниевой шпинели.

Использование Al–Mg сплавов предлагается в патентных публикациях [21, 23, 26, 27, 28, 29, 31, 37, 39].

Значительная часть работ посвящена исследованию огнеупорных материалов, содержащих в качестве антиокислительных добавок соединения бора в сочетании с Al–Mg добавками или без них.

Эффективной добавкой считается карбид бора B_4C [6, 24] (сравнительные данные с Al и Mg добавками приведены ниже [9, 22]). В процессе службы B_4C реагирует с CO, разлагаясь при этом с выделением углерода и образованием борного ангидрида B_2O_3 . Вследствие значительного увеличения объема изделия форсируется уплотнение структуры и закрытие пор. Образовавшийся B_2O_3 превращается в соединение типа MgO – B_2O_3 и при высоких температурах образующаяся жидккая фаза защищает огнеупор от окислению. Установлено, что введение 0,5 % B_4C приводит к значительному повышению устойчивости к окислению. Добавка карбида бора ограничивает также растворимость MgO в шлаке. В [24] отмечено, что B_2O_3 снижает коррозионную стойкость огнеупорных изделий. Однако, когда износ изделий определяется окислением, то введение B_4C считается эффективным средством. Эти данные формально не согласуются с более поздними исследованиями [22] (см. ниже). Их сопоставление не представляется возможным, ввиду различных условий экспериментов, а также неполной информации об исследуемых системах и условиях испытаний.

Промышленный университет Нагояя, Япония [9] провел сравнительное исследование следующих добавок: алюминия, сплава магния с алюминием, карбида бора B_4C , композиции Al–Mg: $\text{B}_4\text{C} = 1:1$, а также $\text{Al}_8\text{B}_4\text{C}_7$. Изучались формовки размером $20 \times 20 \times 5$ мм, прессованные из шихты состава MgO : графит = 80:20 с соответствующими добавками в количестве 5 % (сверх 100 % шихты), нагретые до 150 °С со скоростью 10°/мин и выдержаные при конечной температуре 2 часа. Наименьшей потерей массы отличался образец с добавкой B_4C . Рентгеновской дифракцией в нем обнаружен углерод, что свидетельствует о высокой стойкости к окислению. Объясняя такой результат, авторы работы [9] ссылаются на выводы, изложенные в [24] (приведены выше). При нагревании образец значительно деформировался, вследствие образования большого количества расплава MgO – B_2O_3 . В образцах, имеющих в составе другие добавки, также обнаружен эффект замедления обезуглероживания огнеупора, но в меньшей степени (в порядке убывания: Al–Mg: $\text{B}_4\text{C} = 1:1$, Al, сплав Al–Mg, $\text{Al}_8\text{B}_4\text{C}_7$). Деформация этих образцов не наблюдалась. Авторы [9] считают, что при добавлении $\text{Al}_8\text{B}_4\text{C}_7$ его разложение сопровождается образованием B_2O_3 , который на поверхности огнеупора превращается в расплав системы расплава MgO – B_2O_3 . Предполагается, что в образцах с добавками, содержащими магний, в начале нагревания происходило испарение Mg – компоненты с последующей конденсацией на поверхности в виде MgO . Если в такой системе присутствовал оксид бора, то в дальнейшем происходило образование расплава системы MgO – B_2O_3 .

В более поздних работах [15, 35] исследовано поведение добавки $\text{Al}_8\text{B}_4\text{C}_7$ при отжиге в среде угарного газа CO с тем, чтобы определить возможность использования данного соединения в качестве антиоксиданта в углеродсодержащих системах MgO – C и Al_2O_3 – C . При температуре выше 1100 °С $\text{Al}_8\text{B}_4\text{C}_7$, находящийся в поверхностном слое, взаимодействовал с образование твердого Al_2O_3 , жидкого B_2O_3 и твердого C. Оксид бора в дальнейшем при взаимодействии с MgO переходил

дил на поверхности в жидкофазное соединение состава $Mg_3B_2O_6$, стабильное на воздухе до 1400 °C и способствующее уплотнению защитного слоя, а взаимодействуя с Al_2O_3 оксид бора превращался в $Al_{18}B_4C_{33}$, который на воздухе разлагался при температуре менее 1300 °C. Из этого авторы [15] сделали заключение о большей эффективности антиокислительной добавки $Al_8B_4C_7$ для систем MgO–С. По данным [35] оксид алюминия Al_2O_3 , образовавшийся при разложении $Al_8B_4C_7$ ($Al_{18}B_4C_{33}$), на поверхности материала взаимодействует с MgO , превращаясь в шпинель $MgAl_2O_4$. При температуре выше 1333 °C процесс контролируется диффузией кислорода, ниже – химической реакцией.

В [22] также проводилось сравнительное изучение добавок, содержащих алюминий, включая следующие системы: Al, Al–Mg, Al–Mg–B. Для экспериментов изготовили MgO–С изделия из электроплавленного магнезиального клинкера чистоты 98,5 % и чешуйчатого графита с металлической добавкой алюминия 3 % во всех составах (только Al- в образце А), дополнительно с добавкой Mg – 0,5–5 % (образцы В, С, D, E), и, дополнительно к Al–Mg, с добавкой соединений бора (образцы F, G, H, I, J, K). Бор вводили в виде нитрата бора BN, карбида бора B_4C , или борной кислоты. Параллельно такую же партию образцов подвергали термообработке восстановительной среде при 1400 °C в течение трех часов.

Для всех образцов определяли кажущуюся плотность, открытую пористость и прочность на изгиб при 1400 °C. Для образцов, необработанных и термообработанных в восстановительной среде эти величины соответственно составили: 2,89–2,96 и 2,62–2,85 г/см³; 3,6–4,8 и 10,1–18,1 %; 14,4–19,7 и 5,3–17,8 МПа.

Все образцы также испытывали на коррозионную стойкость во вращающемся барабане с синтетическим шлаком отрегулированной основности C/S=3,0 при 1750 °C в течение 8 часов. Образцы с добавкой Mg после отверждения обнаружили повышенную коррозионную стойкость, так как магний обладает более высоким, чем алюминий, сродством к кислороду. Однако для таких же образцов, но термообработанных в восстановительной среде коррозионная стойкость понижалась с увеличением количества магния. Причиной этому может быть, по мнению авторов, повышение пористости после термообработки, а также улетучивание магния в условиях недостатка кислорода в поверхностных слоях (магний обладает высоким давлением паров). Образцы с трехкомпонентной добавкой (включая соединение бора) сохраняли высокую коррозионную стойкость до и после восстановительной термообработки. При добавке 1 % магния индекс коррозии составил 79 против 100 для базового состава, а с добавкой третьего компонента этот индекс был равен соответственно: 39 с нитридом бора, 43 с карбидом бора, 47 с борной кислотой. Исследовали структуру окисленных образцов А, С, Н. Установлено, что в зависимости от присутствия боросодержащего компонента слой периклаза имеет ту или иную плотность. Авторы [22] считают, что при окислительных испытаниях в образцах без добавки соединений бора часть магния не превращается в периклаз, взаимодействуя с кислородом, а испаряется.

Высокая стоимость карбида бора B_4C стимулирует поиск других боросодержащих соединений, которые можно использовать в комплексных добавках [24]. Установлено, что при введении только B_2O_3 (в виде или B_2O_3 – MgO , или B_2O_3 – CaO) происходит взаимодействие углерода с оксидом бора при температуре выше 1200 °C с образованием газа CO и паров бора, диффундирующими наружу. Сдерживание диффузии происходит при добавлении в вышеуказанные комбинации порошка алюминия. В [24] также приводятся результаты исследований, в которых углеродсодержащие образцы (15 % С) модифицировали следующими простыми и сложными по составу добавками: A1(5 %); сплав A1 с Mg (5 %); A1(3 %)+ CaB_6 (1 %); сплав A1 с Mg (5 %)+ CaB_6 (1 %); CaB_6 (1 %). Введение CaB_6 ограничили 1 %, чтобы избежать большого снижения коррозионной стойкости. Установлено, что в результате одновременного введения в конвертерные периклазоуглеродистые изделия добавок алюмомагниевого сплава в сочетании с CaB_6 , прочность данных изделий в горячем состоянии и их устойчивость к окислению значительно повысилась без ухудшения термостойкости.

В работе [2] исследовалась сравнительная активность боросодержащих антиоксидантов (TiB_2 , B_4C , MgB_2 , CrB_2 , BN, $B_{\text{аморф}}$ – 95 %, $B_{\text{аморф}}$ – 85 %, $B_{\text{аморф}}$ – 55 %, борон-2000) термогравиметрическим методом. Образующиеся при этом фазовые отношения определялись рентгенфазовым анализом. Эффективность антиоксидантов оценивали по увеличению массы образцов при нагревании до 1000 °C, до постоянной массы в воздушной среде. Устойчивым на воздухе оказался нитрид бора. В остальных случаях величины и характер экзотермических эффектов на деривато-

граммах, вследствие процессов окисления, а также увеличение массы при прокаливании на воздухе, позволяют рассчитывать на получение положительных результатов при сохранении углерода, в случае использования исследуемых соединений в качестве антиоксидантов в углеродсодержащих огнеупорах. Далее исследовались прочностные характеристики и степень выгорания углерода прессовок, приготовленных из порошков плавленого периклаза (90 %) и чешуйчатого графита (10 %) с добавками различных антиоксидантов или «свидетеля» (0,5; 5; 10 %) и спеченных при нагреве до 1000 °C с последующим спонтанным охлаждением на воздухе. По результатам данных сравнительных исследований сделано заключение о том, что в присутствии боросодержащих антиоксидантов модельные системы приобретают дополнительную жаростойкость и прочность за счет приповерхностных превращений при формировании керамики. Отечественные препараты В_{аморф} – 95 %, В_{аморф} – 85 % являются лучшими аналогами антиоксиданта борон 2000 (американского производства) и превосходят его по обеспечению в процессе спекания керамики прочности на сжатие и минимизации степени выгорания углерода.

Влияние CrB₂ на свойства магнезиальноуглеродистых огнеупоров исследовали в [38], с использованием модельных систем состава: MgO – 80 %, C – 20 % и дополнительно 4 % антиоксиданта CrB₂. Испытание на прочность при трёхточечном изгибе и распределение пор по диаметру проводили после нагрева образцов в слое углеродистого порошка со скоростью 600°/мин до 600–1400 °C, затем выдержки 4 часа и последующем охлаждении при комнатной температуре. Относительный объем пор размером около 15 мкм в образцах с добавкой CrB₂ оказался меньше, чем в образцах без добавки. Прочность на изгиб образцов без добавки с повышением температуры нагрева понижалась, в образцах с диборидом хрома – оставалась постоянной. Авторы [38] связывают такое изменение прочностных характеристик с изменением пористости. Считают, что взаимодействие диборида хрома с CO в огнеупоре сопровождается объемным расширением, что приводит к релаксации пор и ограничивает разупрочнение. Образцы с комбинированными добавками алюминия и борида циркония ZrBr₂ фирмы «Асахи Гарасу» (90 % MgO, 10 % CaO, 1,5 % Al₂O₃) демонстрируют повышенную устойчивость к окислению без снижения коррозионной стойкости [6, 24]. При исследовании скорости окисления углерод-углеродного композиционного материала [13] отмечено, что модифицирование матрицы бором повышает стойкость такого материала к окислению.

Наряду с исследованием возможности применения в качестве антиоксиданта диборида титана [2], патентуются коррозионностойкие углеродсодержащие огнеупоры системы MgO–Al₂O₃–C–SiO₂–CaO–Fe_xO_y–Cr₂O₃ с добавками TiO₂ в широком диапазоне концентраций 2–50 % и размером частиц 0,2–2000 мкм [11]. Повышенная коррозионная стойкость материалов обусловлена, по мнению авторов, тем, что расплав фазы оксида титана заполняет поры и предотвращает попадание в них шлака. В [10] исследовано влияние добавок TiO₂ на шлакостойкость магнезиальнохромитового огнеупора. Наряду с описанием нового способа введения графита в основные огнеупорные материалы на основе MgO в [12] показана роль антиоксидантов. В [16] предлагается защищать графитовые чешуйки от окисления предварительно нанесенным методом гидролиза хлорида титана при 370 °C поверхностным слоем оксида титана. Определены оптимальные условия такого гидролиза.

В патентных публикациях [17, 18, 29, 37, 39, 40] сообщается о введении в состав шихты для приготовления магнезиальноуглеродистых огнеупоров карбидокремниевой добавки в качестве антиоксиданта. В [17, 18] при изготовлении шпинельно-периглазоуглеродистого огнеупора – это силицированный графит или отходы силицированного графита в количестве 1–5 мас. %. В [29, 37, 40] карбид кремния применяется в комплексных добавках, включающих алюминий и магний.

В патентуемых углеродсодержащих огнеупорных материалах [14] указывается на использование 1–5 % сверх 100 % шихты антиоксидантов фракции 0,15 мм.

В [30] предложен новый способ повышения стойкости к окислению углеродсодержащих магнезиальных или глиноземистых огнеупоров – введение катализаторов, понижающих температуру коксования ниже 1000 °C с образованием кристаллической графитовой фазы. Катализаторы вводят в количестве 0,1–10 % от массы углеродистой связки – например, фенолформальдегидной смолы. В качестве катализаторов используются легковосстановляющиеся соединения переходных металлов (Cu, Cr, Ni, Fe), в частности, металлоцены, бензоаты, октоаты или нафтанаты металлов, а также металлические катализаторы типа Ni, Pt, Rh. Полученные огнеупоры отличаются повышенной стойкостью в окислительной среде.

Анализ рассмотренных данных показывает, что к промышленно используемым антиокислильным добавкам относятся составы на основе алюминия и магния. Перспективными являются соединения кремния, бора, титана. Однако системные исследования ни модельных, ни промышленных образцов не проводились. Механизмы стабилизации углерода и повышения износостойчивости с помощью антиоксидантов, процессы фазообразования в огнеупорных материалах при введении данных добавок в настоящее время недостаточно исследованы.

Литература

1. Красс Я.Р. Технология производства износостойчивых магнезиальных огнеупоров с точки зрения современного направления развития сталеплавильных и других процессов, экологии, ресурсосбережения, компьютеризации // Огнеупоры и техническая керамика. – 2002. – №12. – С. 11–12.
2. Антиоксиданты в углеродсодержащих огнеупорах/ В.Г. Бамбуров, О.В. Синцова, В.П. Семянников и др.// Огнеупоры и техническая керамика. – 2000. – №2. – С. 2–5.
3. Суворов С.А., Денисов Д.Е. и др. Фазовые превращения огнеупоров при окислительно-восстановительных взаимодействиях компонентов// Огнеупоры и техническая керамика. – 1987. – №9. – С. 26–30.
4. Хорошавин Л.Б., Перепелицин В.А. Углеродизация огнеупоров// Огнеупоры и техническая керамика. – 1999. – №6. – С. 4–12.
5. Хорошавин Л.Б., Перепелицин В.А., Кононов Н.В. Магнезиальные огнеупоры: Справочник. – М.: Интермет Инжиниринг, 2001.
6. Влияние антиоксидантных добавок на свойства безобжиговых углеродсодержащих огнеупоров/ В.Е. Кривокорытов, Н.А. Макаров, Н.В. Кононов и др.// Огнеупоры и техническая керамика. – 1999. – № 12.
7. Очагова И.Г. Совершенствование углеродсодержащих огнеупоров для футеровки кислородных конвертеров Японии (реферат) // Огнеупоры и техническая керамика. – 1987. – № 8. – С. 54–62. (Naruse Y., Hiragushi R., Kiwaki S.// Ceramic Engineering and Sciens Proceeding. – 1986. – V.7. – № 1. – Р. 1119–1130).
8. Изготовление периклазоуглеродистых огнеупоров и испытание их в футеровке 370 т конвертера/ Л.М. Аксельрод, А.В. Квятковский, И.П. Орлов и др. // Огнеупоры и техническая керамика. – 1999. – №5.
9. Совершенствование периклазоуглеродистых изделий для футеровки сталеплавильных агрегатов и сталеразливочных ковшей. Сравнение добавок в магнезиально-углеродистые огнеупоры // Новости черной металлургии за рубежом. – 2001. – №1. – С. 116–117 (Onoda K., Hashimoto S., Yamaguchi A. // Taikbutsu. – 1999. – V.51. – №116. – Р. 607).
10. Li Xin. Влияние оксида титана на шлакостойкость магнезиально-хромитового огнупора / Xin Li, Shugu Dou// (Китай, Armoured Forces Engineering Institut, Beijing 100072) Naihuo cailiao=Refractories. – 2001. – V.35. – №3. – Р.144–146.
11. Применение материалов в качестве добавки к огнеупорным изделиям: Заявка 19935251 Германия, МПК⁷С 04 B35/65. Metallgesellshaft AG, GSR-Ges für synthetische Rohstoffe mbH, Amirzaden-Asl Djamschid, Fünders Dieter №19935251.8; Заявлено .27.07.1999; Опубл. 08.02.2001 Нем.
12. Rigaud M.A., He H., Kovac V. New ways of inserting graphite into basic castabls // Amer. Chem. Soc. – 2001. – V. 3. – № 4. – Р. 269.
13. Cai Da-yong Поведение при высокотемпературном окислении углерод-углеродистого композиционного материала с модифицированной матрицей/ Da-yong Cai, Ju-long He, Dong-li Yu, Yong-jun Tian, Dong-chun Li // Tansuojishu = Carbon Techn. – 2000. – № 2. – Р. 24–26.
14. Углеродсодержащий огнеупор. Патент 2163900. МПК⁷ 04 35/103, 35/66 ОАО «Семилукский огнеупорный завод»/ В.И. Энгин, Н.М. Аңжеуров, Г.Е. Карась и др. – №2000108318/03. Заявлено 03.04.2 Опубл. 10.03.2001.
15. Wang Tianming. Стойкость к окислению и влияние добавок Al₂B₄C₇ на устойчивость огнеупоров / Tianming Wang, Akira Yamaguchi// J.Ceram.Soc.Jap. – 2000. – 108, № 1261. – Р.818–822.
16. Iang Zhihong. Поверхностная обработка графита гидролизом осадка / Zhihong Iang, Wengjie Zhang, Zhoufu Wang // Naihuo cailiao = Refractories. – 2001. – V.35. – №2. – Р.66–68 (Китай).
17. Шпинельно-периклазоуглеродистый огнеупор. Заявка 97118321/03. Россия. МПК⁶ С 04 В 35/443; ОАО «Комбинат Магнезит»/ А.М. Чуклай, Н.Г. Гордеев, О.Ф.Шатилов и др.– №97118321/03. Заявлено 30.10.97. Опубл. 10.09.99. Бюл. №25.

18. Шпинельно-периклазоуглеродистый огнеупор. Патент 2148049. Россия, МПК⁷ C 04 B 35/443/ Чуклай А.М., Гордеев Н.Г., Шатилов О.Ф., Бибаев В.М., Гущин В.Я., Коптелов В.Н., Фролов О.И., Спесивцев С.В., Елкина Т.В.; ОАО Бюл.№25.
19. Способ изготовления антиоксиданта. Патент 2147565 Россия, МПК⁷ C 04B 35/035 ОАО «Боровичский комбинат огнеупоров»/ В.А. Можжерин, В.Я. Сакулин, В.П. Мигаль и др. – №98118179/03. Заявлено 02.10.1998. Опубл. 20.04.2000. Бюл. №11.
20. Бамбуров В.Г. Сивцова О.В. Антиокислители в углеродсодержащих огнеупорах// Химия тв. тела. Структура, свойства и применение новых неорганических материалов. – 1998. – №2. – С. 66–72.
21. Огнеупорный материал с улучшенной шлакостойкостью. Заявка 100119600. Германия, МПК⁷ C 04 B35/58, 35/482 Elektroschmelzwerk Rempten, GmbH, Hunold Klaus, Brusner Peter, №100119600 – 4. Заяв. 02.04.2000; Опубл. 31.01.2001; Нем.
22. Совершенствование магнезиальноуглеродистых огнеупоров. Влияние добавки металлического магния на коррозионную стойкость магнезиальноуглеродистых изделий/ Очагова И.Г. (реферат) // Новости черной металлургии за рубежом. – 2001. – №4. – С. 96–97 (Hatae E., Suruga T., Hokii T. // Taikabutsu. – 2001 – V.53 – № 2. – P.74–75).
23. Способ приготовления огнеупорной массы: Патент 2151125 Россия, МПК⁷ C 04 B 35/035 / ОАО «Боровичский комбинат огнеупоров»/ В.А. Можжерин, В.Я. Сакулин, В.П. Мигаль и др. – №98121834/03. Заявл. 30.11.1998; Опубл. 20.06.2000. Бюл. №7.
24. Очагова И.Г. Периклазоуглеродистые огнеупоры для футеровки кислородных конвертеров, дуговых печей и агрегатов внепечной обработки стали// Новости черной металлургии за рубежом. – 1995. – №1 – С. 137–149.
25. СуворовС.А., Борзов Д.Н. Влияние металлических добавок на свойства периклазоуглеродистых огнеупоров // Реф. ж. прикл. химии РАН – СПб. – 1998. – 11с., библ. 20 назв., рус. Депониров.в ВИНТИ 15.7.98 №2228–В98.
26. Углеродсодержащие огнеупоры: Заявка 97118370, Россия, МПК⁶, С 04B35/103/ А.М. Чуклай, В.П. Семянников, В.Е. Гельфенбейл и др. – №97118370/03; Заявлено 14.11.1997; Опубл. 10.03.1999. Бюл. №7.
27. Шпинельсодержащие огнеупоры на углеродистой связке: Патент 2130440, Россия МПК⁶, С 04 B35/443 / В.Г. Борисов, Д.А. Ермоловичев, С.П. Катаргин, С.А. Тараканчиков; АООТ «СПб. Институт огнеупоров»; «Б.М.Б.– С.Д. «Трейдинг корпорейшн лимитед» (Британские виргинские острова) – №98112539/03; Заявл. 30.06.1998; Опубл. 20.05.1999. Бюл. №14.
28. Углеродсодержащий огнеупор: Заявка, Россия, МПК⁶, С 04 B35/04 ЗАО «Композит-Урал»/ В.П. Семянников, В.Е. Гельшенбейл, Ю.Л. Журавлев, В.Я. Гущин; – №17102413/03; Заявл. 24.03.1997; Опубл. 10.09.1998. Бюл. №25.
29. Огнеупорный материал и способ его получения: Патент, Россия: 2122535, МПК⁶, С 04 B35/66/35/00/ Д.А. Ермоловичев, С.Д. Кабаргин, С.М. Шибанов – №98110656/03; Заявл.10.06.98; Опубл. 27.11.98. Бюл. №33.
30. Углеродсодержащий огнеупор с повышенной стойкостью к окислению и способ его изготовления: Заявка 19954893. Германия МПК⁷ C 04 B35/66. Refratechnik Holding, GmbH & Co. KG, Barhta Peter, Jansen Helge, №19954893.5; Заявлено 15.11.1999; Опубл. 17.05.2001. Нем..
31. Способ изготовления огнеупоров: Авторское свидет. 1309513 СССР, МКИ⁶ C 04 B35/52 / Степанов И.Г., Худяков Н.Г., Зайцев В.Н., Жирнов А.В.: Всесоюзный научно-исследовательский институт нерудных строительных материалов и гидромеханизации, – №3883139/33: Заявлено 15.04.85; Опубликовано 10.11.96. Бюл. №31.
32. Соловушкова Г.Э. Состояние дел и тенденции развития производства и использования углеродсодержащих и бескислородных огнеупоров, применяемых в черной металлургии// Огнеупоры. – 1991. – №4. – С.35–40.
33. Tian Shouxin. Разработка MgO–C кирпичей для шлаковой линии 150 т ковша-печи / Shouxin, Ming Zhao, Shanlin Liu // Naihuo cailiao = Refractories. – 2001. – V.35. – №4. – P.208–209.
34. Совершенствование периклазоуглеродистых изделий для футеровки сталеплавильных агрегатов и сталеразливочных ковшей. Разработка MgO–C изделий с низким термическим расширением/ Новости черной металлургии за рубежом. – 2001. – №1. – С. 110–111 (Hoshiyama Y., Tada H., Torigoe A. // Taikabutsu. – 2000. – V. 52. – №3. – P.132).

35. Yang Tiaming. Защита огнеупоров MgO-C от окисления с помощью Al₈B₄C₇ / Tiaming Yang, Akira Yamaguchi / J. Amer. Ceram. Soc. – 2001. – V.84. – 33. – P.577.
36. Baudin Carmen. Influence of chemical reactions in magnesia-graphite contents in generic products / Carmen Baudin, Carlos Alvarez, Moore Robert E. // J.Amer. Ceram. Soc. – 1999. – V.82. – № 12.– P.3539–3548.
37. Углеродсодержащий огнеупор: Патент 2151124, МПК⁷ C 04 B35/443 ОАО «Боровичский комбинат огнеупоров»/ В.А. Можжерин, В.Я. Сакулин, В.П. Мигаль и др. – №98118178/03: Заявл. 62.10.1998; Опубл. 20.06.2000.
38. Совершенствование периклазоуглеродистых изделий для футеровки сталеплавильных агрегатов и сталеразливочных ковшей. Влияние диборида хрома CrBr на свойства магнезиальноуглеродистых огнеупоров/ Очагова И.Г.(реферат) // Новости черной металлургии за рубежом. – 2001. – №1. – С.117–118 (Higuchi M., Hashimoto S., Yamaguchi A. // Taicabutsu=Refactories. –1999. –V.51. –№11. – P.608).
39. Состав массы углеродсодержащих огнеупоров: Заявка 97118725/03 Россия МПК⁶, C 04 B35/66 / Б.Н. Поляк, В.С. Осипчик, Н.Н. Тихонов и др. РХТУ – № 97118725/03. Заявлено 29.10.97. Опубл. 10.08.99. Бюл. № 22.
40. Шпинельнoperиклазоуглеродистый огнеупор: Заявка 97118322/03 Россия МПК⁶, C 04 B35/035, 35/443 ОАО «Комбинат Магнезит»/ А.М. Чуклай, Н.Г. Гордеев, О.Ф. Шатилов и др. – № 97118322/03 Заявл. 30.10.97. Опубл. 27.08.99. Бюл. №4.

Поступила в редакцию 31 января 2005 г.

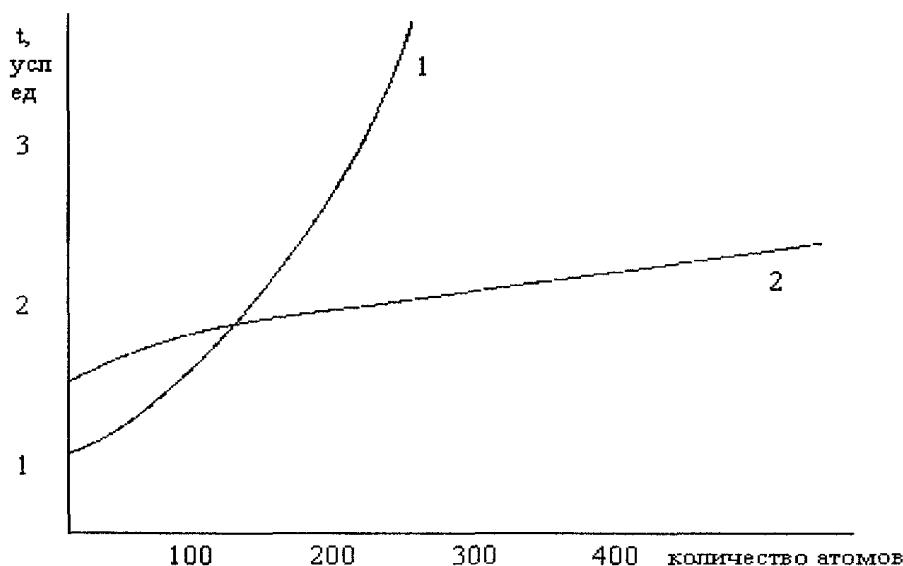
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ СЕГРЕГАЦИИ И ДЕСОРБЦИИ ПРИ ПОМОЩИ МЕТОДА МОНТЕ-КАРЛО: ПРОБЛЕМЫ И ПОДХОДЫ К РЕШЕНИЮ

А.В. Гусев, Т.П. Привалова, А.Е. Чудаков

Предложена оптимизация метода погруженного атома, используемого в сочетании с методом Монте-Карло, позволяющая применять его для моделирования поверхностной сегрегации и десорбции.

После создания метода погруженного атома (МПА) [1] этот метод активно использовался в сочетании с методом Монте-Карло для моделирования равновесной сегрегации в разбавленных растворах [2]. Однако известно, что поверхностная сегрегация, особенно вблизи линии ликвидуса, сопровождается интенсивной десорбцией. При этом десорбируются, преимущественно, атомы элементов с высокой капиллярной активностью [3]. Поэтому проблема моделирования совместно протекающих процессов сегрегации и десорбции весьма актуальна. Естественно, что десорбция сопровождается уменьшением числа атомов. По этой причине усреднение по ансамблю вызывает проблему такого рода для наблюдения длительной по времени десорбции нужно очень большое число атомов, что при конечном времени вычислительного эксперимента означает малое число шагов на атом. Решение этой проблемы можно осуществить в двух направлениях. Во-первых, уменьшить время выполнения одного шага алгоритма Монте-Карло. Во-вторых, восполнение удаленных в ходе десорбции атомов новыми. Оба этих направления были реализованы при модификации существующего алгоритма, использовавшегося для моделирования традиционной для метода МПА равновесной сегрегации в системах Cu–Ag, Cu–Sn и Fe–S [4].

Для увеличения скорости выполнения Монте-Карло алгоритм был использован тот факт, что применяемые в методе МПА значения электронной плотности сравнительно быстро убывают до нуля с ростом расстояния от атома, и перебор всех атомов ансамбля при вычислении общей его энергии сильно замедляет процесс моделирования, особенно на больших ансамблях. Это выражается в том, что вычислительные затраты оказываются пропорциональными квадрату числа атомов в ансамбле. В ходе совершенствования программных компонентов комплекса была поставлена задача добиться линейной зависимости роста затрат от увеличения общего числа атомов, что и было достигнуто (см. рисунок).



Рост затрат времени при увеличении числа атомов в ячейке:
алгоритм 1 – перебор всех атомов в ячейке; алгоритм 2 – перебор ближайших соседних атомов

Основной проблемой на данном этапе было выделение подмножества атомов, для которых следует производить вычисления энергии. Использование традиционного в таких случаях радиуса обрезания оказалось неэффективным. Это вызвано тем, что после малого смещения атома, для которого производится вычисление энергии, каждый раз в этот радиус попадает разное количество атомов, что делает энергию таких подмножеств трудноопределяемыми. Эта проблема была решена за счет того, что для сдвинутого атома бралось ближайшее атомное окружение еще не сдвинутого атома, естественно, несколько увеличенное окружение, чтобы перекрыть эффекты от сдвига. Это увеличение хотя и замедляет несколько вычисление энергии каждого атома, но обеспечивает линейность роста затрат времени, так как каждый раз вычисляются энергетические вклады от почти постоянного небольшого числа соседей. Предложенный алгоритм оказался более затратным по сравнению с исходным только на очень малых ансамблях (порядка 100 атомов). В то время как при дальнейшем росте количества моделируемых атомов, алгоритм оказывается очень эффективным, даже для трехкомпонентных систем.

Кроме того, хотя метод погруженного атома позволяет использовать данные по чистым элементам для моделирования их сплавов, определенная зависимость от числа компонентов в ансамбле все-таки имеется. Это связано с тем, что вычисляемая общая энергия E взаимодействия имеет слагаемое, описывающее взаимное отталкивание ядер атомов

$$E = \sum_i F_i(\rho_i) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} \phi_j(R_j),$$

где ρ_i – электронная плотность, созданная всеми атомами системы за исключением i -го атома, в точке, где он находится; $F_i(\rho_i)$ – энергия, необходимая для того, чтобы внедрить атом i в точку с электронной плотностью ρ_i ; $\phi_j(R_j)$ – энергия парного отталкивательного взаимодействия атомов i и j , находящихся на расстоянии R_j .

Это слагаемое, фактически, представляет собой сумму энергий парных взаимодействий, которые зависят не от суммарной электронной плотности, в которую погружен атом, а от типа соседних атомов и расстояний до них. Переход к моделированию трехкомпонентных систем потребовал внесения значительных изменений в программу моделирования именно в части описания энергии отталкивательного взаимодействия, что в результате сделало программу для моделирования значительно более универсальной, и практически не сказалось на скорости выполнения.

Примером результатов, полученных при помощи новой программы, являются вычисления поверхностных концентраций при моделировании системы Cu–Ag–Sn [5], хорошо согласующиеся с данными экспериментов, выполненными методом температурно-программируемой десорбции для этой же системы [6].

Другой проблемой при моделировании десорбции был выбор, откуда десорбция может быть осуществлена. Энергия теплового движения атомов при температуре 1000 К составляет примерно $kT \approx 0,1$ эВ. Энергия же связи поверхностного или приповерхностного атома составляет уже 1–3 эВ. С учетом нормального распределения можно осуществить в ходе вычислительного эксперимента изъятие атома хоть из первого, хоть из второго слоя с термодинамической вероятностью. Пробные компьютерные эксперименты по моделированию десорбции показали, что наиболее эффективным в смысле вычислительной устойчивости является моделирование десорбции только из верхнего атомного монослоя. Причиной этого является то, что в однопроцессорных вычислительных системах моделирование многоатомного ансамбля возможно лишь при последовательном переборе атомов, что не противоречит эргодической гипотезе. Однако, при удалении атомов из ячейки эргодичность нарушается, так как среднее вычисляется уже для нового ансамбля. Поэтому в реализованном алгоритме была выбрана такая схема: при сравнительно небольшой ячейке моделирования (порядка сотен атомов) после десорбции очередного слоя вводится новый слой снизу ячейки, что позволяет получать сопоставимые средние по ансамблю значения и приравнивать их к средним по времени. Если принять, что десорбция возможна и из второго атомного слоя, то, как показало пробное моделирование, при таком введении слоев образуются ажурные атомные структуры, очевидно, невозможные с точки зрения физики. А модель десорбции из первого слоя с одной стороны, позволяет легко этого избежать, а с другой стороны была принята ранее для оценки поверхностных концентраций по измеренным потокам десорбции [3].

Следующая проблема, возникающая, если принять вышеизложенный алгоритм десорбции, заключается в способе введения нового монослоя взамен десорбированного. В существующей на данный момент программе моделирования он вводится между двумя нижними слоями вычислительной ячейки. Все атомы выше самого нижнего монослоя поднимаются на одинаковую высоту, и образованное пространство заполняется в соответствии со значением объемной концентрации. Здесь параллельно приходится решать задачу по согласованию межатомных расстояний для нового слоя. Все моделирование сплавов на основе меди, которое производилось в последнее время, выполнялось для поверхности (111)Cu, если речь шла о кристаллическом состоянии, и даже поверхность жидкой меди, согласно предыдущим исследованиям, более всего походила на эту плотную упаковку с максимальным числом соседних атомов и минимальной поверхностной энергией. Для поверхности же (111)ГЦК в направлении [111] период составляет три монослоя, а в одном из перпендикулярных направлений – два монослоя. Произвольное размещение атомов нового монослоя без учета этих кристаллографических особенностей приводило сразу к скачку энергии и потому требовало длительной релаксации. Учет этих особенностей позволяет сильно ускорить алгоритм, реализующий десорбцию.

Учет всех вышеизложенных особенностей позволил создать достаточно эффективную программу для моделирования десорбции. Она показывает для поверхности (111) чистой меди неплохое совпадение с экспериментом, выполненным методом температурно-программируемой десорбции (ТПД), то есть экспоненциальный рост потока десорбции атомов меди с увеличением температуры. В настоящее время проводится работа по моделированию десорбции с поверхности двух- и трехкомпонентных сплавов.

Литература

1. Daw M.S., Baskes M.I. Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals // Phys. Rev. B. – 1984. – V.29. – №12. – P. 6443–6453.
2. Liu Y., Wynblatt P. Computer simulation of phase transitions associated with surface miscibility gaps // Surf. Sci. – 1990. – V.240. – P. 245–252.
3. Привалова Т.П. Поверхностная сегрегация и десорбция компонентов металлических сплавов при фазовых и структурных превращениях. – Дисс. докт. хим. наук. – Челябинск, ЧГТУ. 1995. – 325 с.
4. Чудаков А.Е. Статистические модели поверхностного слоя сплавов Cu–Ag, Cu–Sn и Fe–Sn. – Дисс. к.ф.-м.н.. – Челябинск, ЮУрГУ, 1998. – 102 с.
5. Гусев А.В., Морозов С.И., Привалова Т.П., Чудаков А.Е. Особенности поверхностной сегрегации атомов Ag и Sn в поверхности (111) сплавов Cu–Ag–Sn // Изв. ЧНЦ УрО РАН. – 2003. – № 2 (19).
6. Алексеева Т.О., Гусев А.В., Морозов С.И., Привалова Т.П. Поверхностные фазы в поликристаллическом и жидкоком состоянии сплавов Cu–Ag–Sn // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2003. – Вып. 4.– №8(24). – С.30–33.

Поступила в редакцию 27 апреля 2005 г.

СТРУКТУРА ОСТАТОЧНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ГРАФИТА, ПОЛУЧЕННЫХ ГИДРОЛИЗОМ БИСУЛЬФАТА ГРАФИТА

И.Н. Ковалев, В.В. Викторов, Е.М. Байтингер

Исследована тонкая структура дифракционных линий остаточных соединений бисульфата графита. Обнаружено присутствие в образцах трех фаз, характеризующихся различными межслоевыми расстояниями $d_c = 3,35, 3,40, 3,33, 3,50 \text{ \AA}$. Представлены модели строения обнаруженных фаз.

Остаточные соединения графита, получаемые разложением соединений внедрения графита (СВГ) акцепторного типа, представляют собой специфическую графитоподобную систему [1]. Одним из представителей таких соединений является окисленный графит (ОГ), образующийся при гидролизе бисульфата графита. Интерес к ОГ связан с его использованием в качестве материала для получения пенографита [2].

Существует ряд работ, посвященных описанию особенностей структуры ОГ. Особое место в экспериментальных исследованиях отведено анализу рентгеноструктурной информации (см., например [3, 4]). Однако результаты, как правило, ограничены описанием дифрактограмм ОГ, полученных различными методами и расчетом средних межслоевых расстояний, характеризующих данные образцы. Тем не менее, как литературные данные, так и наши исследования [5] свидетельствуют о присутствии в образцах ОГ нескольких различных областей когерентного рассеяния (ОКР).

Для анализа фазового состава ОГ нами поставлены специальные эксперименты по исследованию профилей (00 ℓ)-линий рентгеновских отражений образцов окисленного графита.

Была синтезирована серия образцов остаточных соединений системы графит–серная кислота. В качестве исходного материала использовали крупнокристаллический графит марки ГТ Тайгинского месторождения. Синтез проводили по следующей методике: исходный материал подвергался обработке в 96%-ной серной кислоте в присутствии окислителя (бихромат калия), до получения бисульфата графита (БГ) необходимой ступени. Получены образцы БГ первой, третьей и четвертой ступеней внедрения. Синтезированный бисульфат подвергали гидролизу и сушили. Продукт обработки – окисленный графит являлся объектом исследования. Нумерация образцов, структурные свойства которых описаны ниже, соответствует ступени внедрения промежуточного соединения (бисульфата графита).

Линии (002) и (004) получены на дифрактометре ДРОН.3М с использованием K_{α} -излучения железа, линии (006) и (008) с использованием K_{α} -излучения меди в режиме сканирования по точкам. Шаг сканирования составил $0,02^\circ$. На рис. 1 приведены профили линий (00 ℓ) образцов ОГ различного типа. Хорошо видно, что экспериментальные кривые, имеют перегибы и дополнительные максимумы, то есть явно проявляют сложное (составное) строение, кроме того, они асимметричны относительно главного максимума. Анализ рентгенограмм показывает, что асимметрия различна для линий различного порядка. Если для отражения (002) центр тяжести пика смещен в сторону меньших углов, то для линий (004) и (008) эффект обратный. Рефлексы (006) для всех образцов сходны и представляют собой дублет $K_{\alpha 1}$ - $K_{\alpha 2}$. Эти факты позволяет сделать предположение о том, что линии отражения окисленного графита являются суперпозицией нескольких линий, соответствующих областям когерентного рассеяния (ОКР) различных типов. Каждая из ОКР характеризуется своим межслоевым расстоянием d_c и другими индивидуальными характеристиками. Подобным наложением дифракционных пиков нескольких фаз были объяснены уширение и асимметрия линий (002) в случае дефектных графитов подвергнутых длительному размолу, нейтронному облучению и другим воздействиям [6]. По аналогии с [6] нами была предпринята попытка выделить составляющие сложных линий, представив их в виде суперпозиции кривых Лоренца. Методика такого анализа описана в [5]. На рис. 2 приведен пример такого разложения, а в табл. 1 даны параметры индивидуальных линий, полученные при разложении экспериментальных (00 ℓ) профилей.

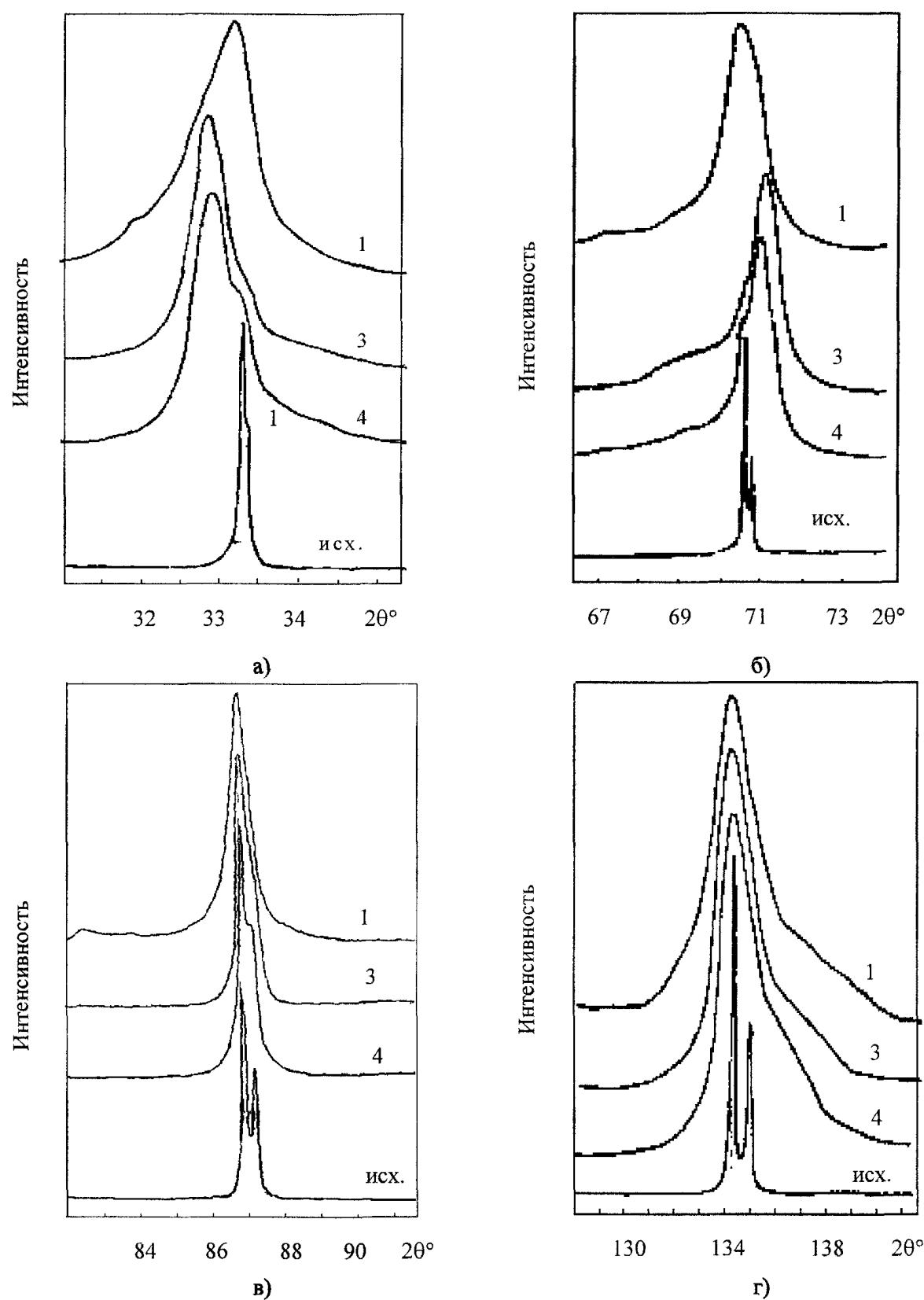


Рис. 1. Профили линий (00l)-отражений расширенного графита: а) (002), б) (004), в) (006), г) (008)

Таблица 1

Параметры разложения профилей (00l) - линий расширенного графита

Образец	Тип ОКР	Параметры	(002)	(004)	(006)	(008)
1	D	$x, 2\theta^\circ$	32,12	67,21		
		$B, 2\theta^\circ$	0,5	0,8		
		I/I_A	0,1	0,1		
	B	$x, 2\theta^\circ$	33,02	69,20		
		$B, 2\theta^\circ$	1,2	3,0		
		I/I_A	0,5	0,2		
	A	$x, 2\theta^\circ$	33,50	70,42	86,92	133,34
		$B, 2\theta^\circ$	0,6	0,8	0,6	1,0
		I/I_A	1,0	1,0	1,0	1,0
3	C	$x, 2\theta^\circ$		71,01		135,03
		$B, 2\theta^\circ$		0,5		2,5
		I/I_A	—	0,4		0,1
	B	$x, 2\theta^\circ$	33,02	69,31		
		$B, 2\theta^\circ$	0,5	2,0		
		I/I_A	6,7	0,8		
	A	$x, 2\theta^\circ$	33,54	70,54	87,05	133,26
		$B, 2\theta^\circ$	0,4	0,5	0,3	0,7
		I/I_A	1,0	1,0	1,0	1,0
4	C	$x, 2\theta^\circ$		71,12		134,87
		$B, 2\theta^\circ$		0,6		2,6
		I/I_A		4,1		0,4
	B	$x, 2\theta^\circ$	33,08	69,46		
		$B, 2\theta^\circ$	0,6	1,9		
		I/I_A	6,6	0,5		
	A	$x, 2\theta^\circ$	33,54	70,56	87,00	133,31
		$B, 2\theta^\circ$	0,5	0,5	0,3	0,7
		I/I_A	1,0	1,0	1,0	1,0
	C	$x, 2\theta^\circ$		71,08		135,04
		$B, 2\theta^\circ$		0,5		2,4
		I/I_A		-3,5		0,6

Здесь, x – положение максимума элементарного пика, B – ширина линии на половине высоты, I – относительная интегральная интенсивность каждой из составляющих. Погрешность определения положения центра тяжести и ширины элементарных линий составляла величину порядка $0,1^\circ$, ее основным источником является отличие формы экспериментальных профилей от идеальной лоренцевской формы.

Анализ данных табл. 1 свидетельствуют о том, что в исследованных образцах присутствуют, по крайней мере, четыре типа областей когерентного рассеяния (ОКР) с близкими межслоевыми расстояниями. Мы обозначили четыре обнаруженные нами фазы латинскими буквами (A, B, C, D). Эти ОКР дают различный вклад в общую дифракционную картину. Факт существования в образце нескольких фаз можно объяснить совместным протеканием ряда различных реакций в процессе обработки и различной степенью их воздействия на структуру графита.

Анализ угловых положений рефлексов первого типа (ОКР- A), позволяет отнести их к графитовым отражениям ($d = 3,35 \text{ \AA}$). Эта фаза наблюдается во всех образцах.

Остальные три фазы (B, C, D) представляют собой графитоподобные области, в различной мере искаженные обработкой. Для ОКР- B наблюдали отражения вблизи узлов (002) и (004) обратной решетки графита. Среднее межслоевое расстояние, вычисленное для данной фазы, колеблется в пределах $3,40$ – $3,42 \text{ \AA}$ в различных образцах. Наблюдаются также существенное уменьше-

ние интенсивности рефлексов с увеличением порядка дифракции, что свидетельствует о сильной неупорядоченности данной фазы. Предполагая, что причиной разупорядочения являются межслоевые примеси, случайным образом распределенные в решетке, поведение рефлексов описывали при помощи модели, приведенной в [7].

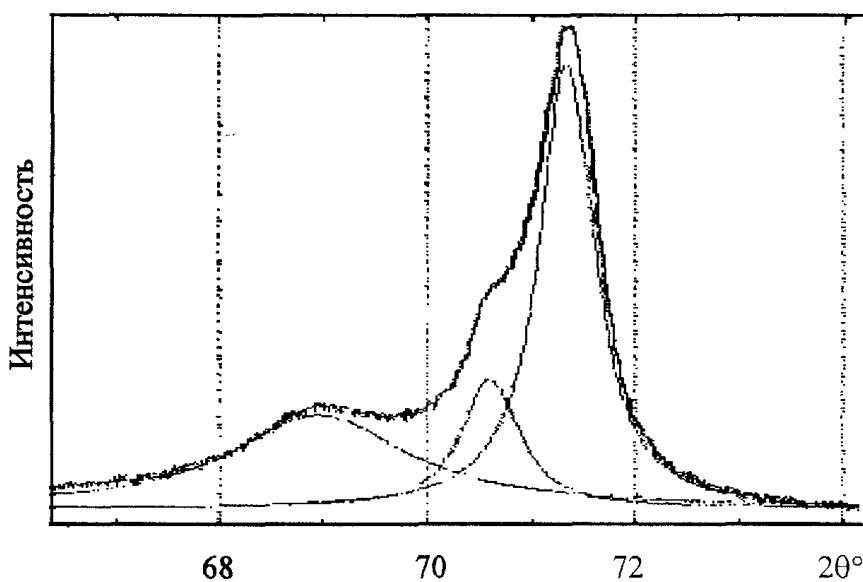


Рис. 2. Пример разложения сложного профиля на составляющие

Согласно [7], при совместном сосуществовании в решетке случайно распределенных областей с различными межслоевыми расстояниями d_1 и d_2 , максимумы пиков наблюдаются в точках, соответствующих среднему параметру d_{cp}

$$d_{-p} = d_1 + p(d_2 - d_1), \quad (1)$$

где p – вероятность существования параметра d_2 .

Отметим сходство данного параметра с числами графитации, предложенными для описания структуры турбостратных углеродов [8].

Для моделируемых объектов интегральная ширина линии B_l при достаточно большом размере кристалла представляет собой величину

$$B_l = \Delta S_l = l^2 \Delta S_1, \quad (2)$$

где

$$\Delta S_1 = \frac{1}{d_{cp}} \pi^2 \frac{\Delta d^2}{d_{cp}^2} p. \quad (3)$$

Здесь ΔS_1 – вклад в ширину 1-го пика, обусловленный искажениями решетки, $\Delta d = d_2 - d_1$.

В том случае, когда число слоев достаточно мало, и уширение линии за счет конечности микрокристалла L сравнимо с вкладом от искажений решетки, для оценки ширины линии использовали выражение:

$$B_l^2 = \left(\frac{1}{L} \right)^2 + (\Delta S_l)^2. \quad (4)$$

Таким образом, имея две линии различного порядка, можно оценить величину размеров ОКР и вероятность p вхождения в структуру ОКР-В примеси. Полученные для некоторых образцов данные приведены в табл. 2.

Таблица 2

Рентгенографические характеристики ОКР-В

Параметры обработки	Тип образца		
	1	3	4
$B_1 \cdot 10^3, \text{ \AA}^{-1}$	15,5	5,9	7,3
$B_2 \cdot 10^3, \text{ \AA}^{-1}$	34,2	22,0	21,5
$\Delta S_1 \cdot 10^3, \text{ \AA}^{-1}$	7,9	5,5	5,2
$L_c, \text{ \AA}$	80	250	190
p	0,08	0,06	0,05
p^*	0,09	0,09	0,07
$D_c, \text{ \AA}$	3,41	3,41	3,40

p^* – параметр, вычисленный из уравнения (1).

В последней строке табл. 2 приведены данные, вычисленные при помощи уравнения (1). Для расчетов брали $d_2 = 3,99 \text{ \AA}$, соответствующее межслоевому расстоянию углерод-интеркалянт в бисульфате графита [1]. В действительности, величина d_2 может несколько отличаться от приведенного значения, поскольку примесь внедрена не единным слоем, а небольшими кластерами, размером около 10 \AA [9]. Таким образом, среднее расстояние между слоями может отличаться от такого в БГ из-за различной степени взаимодействия примесь-матрица, изгиба слоев, краевых эффектов (рис. 3). С этим, по-видимому, связано существующее различие между параметрами p и p^* .

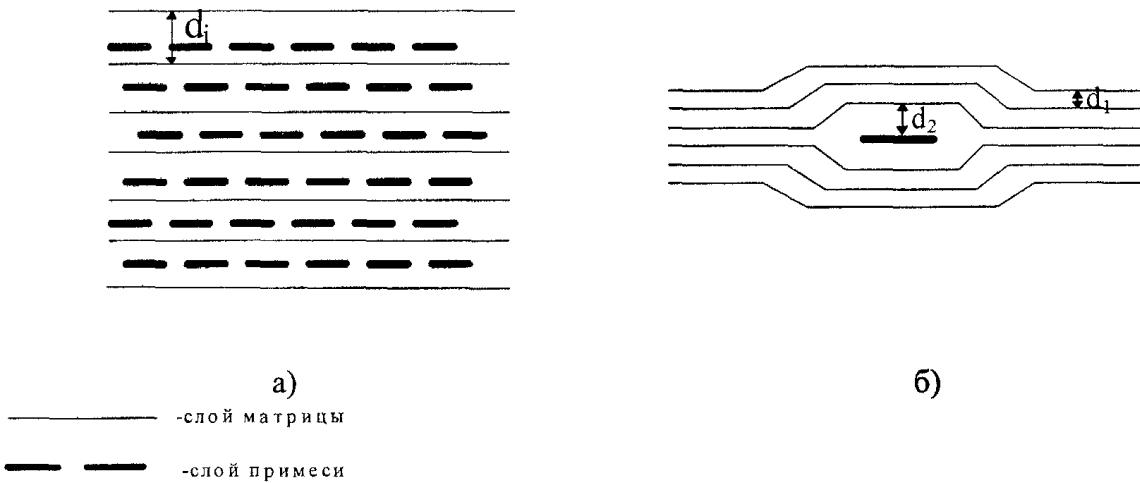


Рис. 3. Распределение примеси в СВГ первой ступени внедрения (а) и в ОКР-В (б)

Дифракционные линии, появляющиеся только в области узлов (004) и (008) обратной решетки графита, отнесены нами к отражениям от ОКР третьего типа (ОКР-С). Период идентичности d_i , вычисленный для данной ОКР, равен $3,33 \text{ \AA}$. Здесь возникает некоторая неоднозначность при интерпретации линий. Параметр d_c в случае ОКР-С может быть равен либо $1,665 \text{ \AA}$ (если первый наблюдаемый рефлекс имеет первый порядок дифракции), либо $3,33 \text{ \AA}$, (если первый наблюдаемый рефлекс имеет второй порядок). Очевидно, что построить структуру, состоящую из одних только графитовых слоев, с расстоянием между ними $1,67 \text{ \AA}$ не представляется возможным. Маловероятно также, что примесь образует собственную кристаллическую фазу таких больших размеров, чтобы она дала дифракционный рефлекс. Поэтому было сделано предположение, что ОКР-С представляет собой образование, сходное по своему строению с соединениями внедрения. Однако малое значение размера периода идентичности d_i противоречит данным по классическим СВГ: для БГ, например, $d_i = 7,98 \text{ \AA}$. Противоречие можно снять, если предположить, что примесь удерживается между слоями ковалентно. Примесь, за счет ковалентных связей «стягивает» соседние слои, что и дает аномально малое межслоевое расстояние. Возможность существования примесных атомов, ковалентно связанных со слоями, неоднократно обсуждалась (см. например [10]). Однако в литературе в качестве межслоевых атомов рассматривали атомы углерода, которые являлись причиной не уменьшения, а увеличения межслоевого расстояния. В нашем случае, наиболее вероятная примесь – атомы кислорода. Длина ковалентной связи С–О равна $1,43 \text{ \AA}$,

угол С–О–С составляет величину порядка 110° . Таким образом, кажется вполне вероятным существование уменьшенного расстояния между ближайшими углеродными слоями в тех местах, где локализован атом кислорода.

Предложенная модель строения ОКР-С представлена на рис. 4. Атомы кислорода образуют эфирные мостики между углеродными слоями. Поскольку sp^2 -гибридность углеродных атомов частично нарушается, слой гофрируется. Состояние гибридизации в этом случае промежуточное между sp^2 и sp^3 . Величину δ – подъема атома углерода над слоем можно оценить исходя из межслоевого расстояния и относительной интенсивности (00l) линий ОКР-С.

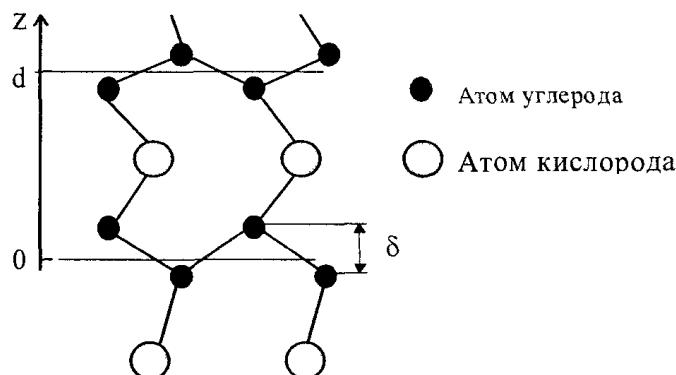


Рис. 4. Расположение примесных атомов кислорода в ОКР-С

Структурный фактор элементарной ячейки рассчитали по формуле:

$$|F_{hkl}|^2 = \left| \sum_j f_j \exp\left[2\pi \cdot i(hx_j + ky_j + lz_j)\right] \right|^2, \quad (5)$$

где f_j – атомный фактор рассеяния j -го атома ячейки, hkl – индексы Миллера, x, y, z – координаты j -го атома ячейки.

Выбрав систему координат таким образом, чтобы расположение слоев было симметричным относительно ее начала (см. рис. 4). Получаем следующее уравнение:

$$|F_{00l}|^2 = \left(\sum_j f_j \cos 2\pi \cdot lz_j \right)^2. \quad (6)$$

Предполагая, что на два атома углерода приходится один атом кислорода, получим:

$$|F_{00l}|^2 = \left(2f_c \cos\left(2\pi \cdot l \frac{\delta}{2d}\right) + f_o \cos\left(2\pi \cdot l \frac{1}{2}\right) \right)^2, \quad (7)$$

где f_o и f_c факторы атомного рассеяния углерода и кислорода, соответственно.

Результаты расчетов при помощи уравнения (6) для структур с различным параметром δ приведены в табл. 3. Для сравнения приведены структурные факторы графита, рассчитанные для двухатомной элементарной ячейки с параметром $c = 3,35$. Сравнивая данные табл. 3 с относительными интенсивностями линий ОКР-С второго и четвертого порядка получаем величину δ в пределах 0,3–0,4 Å.

Таблица 3

Расчет структурных факторов для (00l)-линий ОКР-С

00l	OKR						
	A		C ($\delta=0,0$)		C ($\delta=0,51$)		C ($\delta=0,33$)
	$ F_A ^2$	$ F_C ^2$	$ F_C ^2/ F_A ^2$	$ F_C ^2$	$ F_C ^2/ F_A ^2$	$ F_C ^2$	$ F_C ^2/ F_A ^2$
001	70,56	4,41	0,06	1,31	0,02	2,45	0,03
002	25,81	87,27	3,27	49,03	1,89	62,88	2,43
003	11,56	1,12	0,09	3,64	0,31	2,42	0,20
004	9,61	25,00	2,60	0,07	0,07	5,39	0,56

C/A – отношение структурных факторов ОКР-С и А.

Образование таких систем кажется вполне реальным, если учесть, что как получение, так и гидролиз акцепторных СВГ включают в себя процессы окисления, часто приводящие к образованию окиси графита [11].

Относительно природы ОКР четвертого типа (ОКР-*D*) можно сделать следующие замечания. Слабая зависимость ширины соответствующих линий от порядка дифракции свидетельствует о хорошей упорядоченности данной фазы. ОКР-*D* с межслоевым параметром $d=3,50 \text{ \AA}$ наблюдали лишь в образцах, полученных из БГ первой ступени внедрения. Можно предположить, что ОКР-*D* представляет собой СВГ первой ступени с периодом идентичности 7 \AA . Примесью в этом случае могут являться анионы HSO_4^- , более сильно удерживаемые заряженными слоями, чем молекулы серной кислоты.

В заключение отметим, что окисленный графит представляет сложную многофазную систему с примесями различного типа, неравномерно распределенными в матрице и формирующими ее протяженные участки с искаженной структурой. Количество примеси, способ ее распределения, степень дефектности слоев матрицы сильно зависят от условий синтеза образцов. В этом смысле результаты, касающиеся соотношения интенсивностей пиков каждой из фаз и их ширин, можно считать случайными, поскольку и соотношение фаз, и их размеры зависят от большого числа параметров синтеза, и при незначительном изменении условий существенно меняются. Важно подчеркнуть, что и размер кристаллитов и среднее межслоевое расстояние, вычисленные с использованием ширины и положения интегральных пиков не имеют физического смысла и не могут в достаточной мере характеризовать данный объект. Применение рентгенодифракционного метода к остаточным соединениям графита требует детального анализа линий, основываясь на данных, полученных из разложения интегральных пиков на составляющие.

Работа выполнена при поддержке гранта губернатора Челябинской области Ур. Чел. № 004-03-96072.

Литература

1. Черныш И.Г., Приходько Г.П., Шай В.М., Карпов И.Н. Физико-химические свойства графита и его соединений. – Киев, 1990. – 200 с.
2. Chung D.D.L.// J.Mater.Sci. – 1987. – V.22. – P. 4190.
3. Юрковский И.М., Смирнова Т.Ю., Малей Л.С.// Химия твердого топлива. – 1986. – №1. – С. 127.
4. Пучков С.В., Пузырева Е.В , Комарова Т.В., Федосеев С.Д. //ХТТ. – №5. – 1985. – С.106.
5. Ковалев И.Н., Байтингер Е.М.// О тонкой структуре (00l) линий расширенного графита. деп. N1492-B95 от 25.05.95.
6. Aladekomo J.B., Bragg R.H.// Carbon. – 1990. – V.28. – №6. – P. 897.
7. Гинье А. Рентгенография кристаллов. – М., 1961. – 604 с.
8. Шулепов С.В. Физика углеродных материалов. – Челябинск, 1990. – 336 с.
9. Эмирбеков Э.Т., Байтингер Е.М., Ковалев И.Н., Авдеев В.В.// ФТТ. – 1993. – Т.35. – №.5. – С. 1140.
10. Heggie M.I. // Carbon. – 1992. – V. 30. – №1. – P.71.
11. Ярошенко А.П., Шапранов В.В., Кучеренко В.А. //ХТТ. – 1994. – №.2. – С. 91.

Поступила в редакцию 28 февраля 2005 г.

РАСЧЕТ ТЕМПЕРАТУРНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ТЕПЛОЕМКОСТЕЙ СОБСТВЕННЫХ ШПИНЕЛЕЙ Me_3O_4

А.Г. Рябухин, М.А. Стенников

Предложена математическая модель расчета температурной зависимости молярных теплоемкостей собственных шпинелей Me_3O_4 .

Теплоемкость – важнейшая термодинамическая характеристика. В работах [1, 2] предложена математическая модель для определения стандартных теплоемкостей нестехиометрических соединений. Эта модель основана на надежно проверенной методике расчета интегральной величины (обычно экспериментально измеренной), исходя из дифференциальных значений компонентов системы. Модель основана на представлении, что для всех параллельно протекающих процессов (встречные процессы также являются параллельными) справедлива аддитивность обратных величин. Этот подход подтвержден в работах [1–4]. В работе [5] эта модель успешно использована для расчета температурных зависимостей теплоемкостей оксидов железа. Использованный в этих работах подход можно распространить и на соединения с более сложной структурой, в частности, на шпинели.

Собственные шпинели существуют в двух формах: нормальная $\text{Me}^{2+}[\text{Me}_2^{3+}\text{O}_4]$ и обращенная $\text{Me}^{3+}[\text{Me}^{2+}\text{Me}^{3+}\text{O}_4]$. Различное пространственное расположение разнозарядных ионов металла ведет к необходимости учета величины структурной постоянной [6]. При специфической температуре происходят обращения шпинелей. В этом случае скачкообразно изменяются параметры решеток без изменения кристаллической структуры. Однако, изменение пространственного расположения разнозарядных ионов приводит к изменению структурных постоянных.

Монооксиды марганца и кобальта кристаллизуются в структуре NaCl , сесквиоксиды – в структуре Mn_2O_3 , а шпинели – в структуре MgAl_2O_4 . В рассматриваемом температурном интервале это нормальные шпинели. Структурная постоянная k в этом случае составляет $\left(\frac{8}{3\sqrt{3}}\right)^2 \cdot \sqrt{3} = 4,10560$.

Основным уравнением для расчета C_p нормальных собственных шпинелей валового состава Me_3O_4 является

$$\frac{1}{3}C_p(\text{Me}_3\text{O}_4) = \frac{1}{2}C_p(\text{Me}_2\text{O}_3) - C_p(\text{Me}) + \frac{1}{2}C_p(\text{O}_2) + \frac{1}{2}kC_p(\text{Me}_2\text{O}_3). \quad (1)$$

В литературе [7] имеются надежные данные по теплоемкостям марганца и его оксидов, достаточные для проведения проверки предлагаемой модели:

$$C_p(\text{Mn}) = 26,996 + 4,219 \frac{T}{1000} - 1,743 \frac{10^5}{T^2}; \quad (2)$$

$$C_p(\text{Mn}_2\text{O}_3) = 103,140 + 35,085 \frac{T}{1000} - 13,523 \frac{10^5}{T^2}; \quad (3)$$

$$C_p(\text{Mn}_3\text{O}_4) = 149,720 + 50,786 \frac{T}{1000} - 19,646 \frac{10^5}{T^2}. \quad (4)$$

Результаты расчета по ур. (1) с использованием температурных зависимостей теплоемкости (2) и (4) приведены в табл. 1. В верхних строках приведены значения, определенные экспериментально, в нижних – полученные теоретически.

Однако в справочной литературе отсутствуют данные по температурной зависимости теплоемкости C_p сесквиоксида кобальта Co_2O_3 , поэтому представляет интерес нахождение ее аналитического выражения.

Таблица 1

Молярные теплоемкости собственной шпинели марганца при различных температурах [7–11]

Вещество	C_p							
	T, K							
	298	400	500	600	700	800	900	1000
O_2	29,378±0,008	30,108	31,093	32,093	32,986	33,739	34,363	34,880
Mn	26,293±0,209	27,594	28,408	29,043	29,594	30,099	30,578	31,041
Mn_2O_3	98,388±0,419	108,722	115,273	120,435	124,940	129,095	133,047	136,873
Mn_3O_4	142,770±0,139 142,820	157,756 157,711	167,255 167,253	174,734 174,727	181,261 181,249	187,279 187,264	193,002 192,984	198,541 198,521

Исходными величинами для проведения расчета являются [7]:

$$C_p(\text{Co}) = 20,255 + 18,003 \frac{T}{1000}; \quad (5)$$

$$C_p(\text{Co}_3\text{O}_4) = 150,274 + 71,511 \frac{T}{1000} - 23,949 \frac{10^5}{T^2}. \quad (6)$$

Известно, что температурный предел устойчивости Co_2O_3 составляет $T=718\text{K}$, при более высоких температурах он разлагается с образованием Co_3O_4 и O_2 . Это условие накладывает ограничение на температурный интервал применимости ур. (1).

Решение ур. (1) относительно $\frac{1}{2}C_p(\text{Me}_2\text{O}_3)$ дает квадратное уравнение. Для упрощения расчета введем обозначения: $C_p(\text{Me}) = z$, $\frac{1}{2}C_p(\text{O}_2) = v$, $\frac{1}{3}C_p(\text{Me}_3\text{O}_4) = y$, $\frac{1}{2}C_p(\text{Me}_2\text{O}_3) = x$. Корнем этого квадратного уравнения является

$$x = - \left\{ \frac{1}{2k} \left[z + v - \left(k + \frac{1}{6} \right) y \right] \right\} + \sqrt{\left\{ \frac{1}{2k} \left[z + v - \left(k + \frac{1}{6} \right) y \right] \right\}^2 + \frac{1}{k} (z + v) y}. \quad (7)$$

Результаты расчетов по ур.(7) с использованием температурных зависимостей (5) и (6) приведены в табл. 2.

Результаты расчетов $C_p(\text{Co}_2\text{O}_3)$ по ур.(7) позволяют предложить полином температурной зависимости

$$C_p(\text{Co}_2\text{O}_3) = 103,706 + 49,238 \frac{T}{1000} - 16,606 \frac{10^5}{T^2}. \quad (8)$$

Расчеты $C_p(\text{Co}_2\text{O}_3)$ по ур.(8) приведены в последней строке табл. 2.

Таблица 2

Молярные теплоемкости сесквиоксида кобальта при различных температурах [7–11]

Вещество	C_p					
	T, K					
	298	400	500	600	700	718
$\frac{1}{2}\text{O}_2$	14,689	15,054	15,5465	16,0465	16,493	16,561
Co	25,623±0,084	27,456	29,257	31,057	32,857	33,181
Co_2O_3	144,654±0,419	163,910	176,450	186,528	195,444	196,973
Co_2O_3 ур.(7)	99,730±0,419 99,707	113,028	121,689	128,637	134,784	135,838
Co_2O_3 ур.(8)	99,706	113,022	121,683	128,636	134,784	135,838

Заключение

1. Математическая модель расчета температурной зависимости теплоемкости собственных шпинелей проверена на оксиде марганца. Наблюдаются хорошее согласие расчетных и экспериментально определенных величин. Это позволяет использовать разработанную методику для расчета температурной зависимости теплоемкости других соединений.
2. Предсказана температурная зависимость теплоемкости сесквиоксида кобальта Co_2O_3 (предложен полином расчета).

Литература

1. Рябухин А. Г. Модель расчета стандартных теплоемкостей C_p^0 нестехиометрических соединений // Изв. ЧНЦ УрО РАН. – 2003. – Вып. 4 (21). – С. 38–42.
2. Рябухин А. Г. Расчет молярных теплоемкостей C_p^0 нестехиометрических бинарных соединений (бертоллидов) // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2003. – Вып. 4. – №8 (24). – С.134–141.
3. Рябухин А. Г., Стенников М. А. Расчет стандартных теплоемкостей нестехиометрических оксидов Ti, Zr и Hf // Изв. ЧНЦ УрО РАН. – 2003. – Вып. 4 (21). – С.43–46.
4. Рябухин А. Г., Стенников М. А. Расчет стандартных теплоемкостей нестехиометрических оксидов V, Nb и Ta // Изв. ЧНЦ УрО РАН. – 2004. – Вып. 1 (22). С.87–90.
5. Рябухин А.Г., Стенников М.А. Температурная зависимость молярной теплоемкости оксидов железа// Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2003. – Вып. 3. – №2 (18). – С. 28–29.
6. Рябухин А.Г. Нормальные и обращенные шпинели // Тр. XI Международной конф. «Современные проблемы электрометаллургии стали». – Челябинск: ЮУрГУ. – С.55–58.
7. Уикс К.Е., Блок Ф.Е. Термодинамические свойства 65 элементов, оксидов, галогенидов, карбидов и нитридов/ Пер. с англ. – М.: Металлургия, 1965. – 240 с.
8. Термодинамические свойства индивидуальных веществ/ Под редакцией В.П. Глушко. – М.: Наука, 1978. – Т.1. – кн.2. – 326 с.
9. Термодинамические свойства индивидуальных веществ/ Под редакцией В.П. Глушко. – М.: Наука, 1982. – Т.4. – кн.2. – 559 с.
10. Термические константы веществ/ Под ред. В.П. Глушко. – М.: АН СССР, ВИНИТИ, 1972. – Вып.VI. – Ч.1. – 369 с.
11. Термические константы веществ/ Под ред. В.П. Глушко. – М.: АН СССР, ВИНИТИ, 1974. – Вып.VII. – Ч.2. – 343 с.

Поступила в редакцию 27 июня 2004 г.

ТЕМПЕРАТУРНАЯ ЗАВИСИМОСТЬ МОЛЯРНОЙ ТЕПЛОЕМКОСТИ ОКСИДОВ ХРОМА

А.Г. Рябухин, М.А. Стенников

Рассчитаны теплоемкости оксидов хрома при различных температурах. Определены составы оксидов, отвечающие границам областей твердых растворов при различных температурах. Экспериментальные и теоретически рассчитанные величины хорошо согласуются.

Хром – химический элемент VI B группы Периодической системы. Валентная электронная конфигурация хрома $3d^54s^1$ обусловливает образование оксидов различного состава, в которых для хрома характерны степени окисления +2, +3, +4 и +6. Теплоемкость таких оксидов меняется в широких пределах в зависимости от состава и температуры. Однако имеющиеся в справочниках данные по температурным зависимостям теплоемкостей оксидов d-элементов и, в частности, хрома неполны. Поэтому представляет интерес теоретический расчет значений теплоемкости.

В основе разработанной модели модели лежит тот факт, что при параллельно протекающих процессах интегральная величина является аддитивной функцией от обратных значений величин компонентов. Это подтверждается многочисленными закономерностями в области физики и химии [2, 3]. Гиперболическая зависимость теплоемкости оксидов d-элементов от состава и структуры кристаллов была подтверждена в [1–4].

Все поле диаграммы $C_p - x$ разбивается, как минимум, на две области твердых растворов (о. т. р.). В первой области кристаллообразующим компонентом является металл, и расчеты проводятся с использованием уравнения

$$\frac{1}{C_p(\text{MeO}_x)} = \frac{1}{C_p(\text{Me})} - \frac{x}{\frac{1}{2}C_p(\text{O}_2) + (1+k)C_p(\text{Me})}, \quad (1)$$

где C_p – молярная теплоемкость оксида, отнесенная к одному молю металла, Дж·моль⁻¹·К⁻¹; k – структурная постоянная (геометрическая величина, независимая от температуры при неизменных кристаллических структурах).

В системе Cr–O хром кристаллизуется в ОЦК структуре (α -Fe), а низший стехиометрический оксид CrO – в структуре ГЦК (NaCl). В результате комбинации структурных постоянных получаем $k = \frac{3\sqrt{3}}{8} \cdot \sqrt{2} = 0,91856$.

Во второй области твердых растворов реперной точкой можно выбрать любой устойчивый оксид. В данной работе в качестве репера выбран оксид Cr_2O_3 (гексагональная структура α - Al_2O_3). Таким образом, в этой области происходит переход от CrO к Cr_2O_3 и, как следствие, от структуры ГЦК к ромбоэдрической, что приводит к $k_1 = \left(1 + \frac{\sqrt{3}}{4}\right) \cdot \frac{8}{3\sqrt{3}} \cdot \sqrt{2} = 3,120133$. Уравнение

для расчета во второй о.т.р. принимает вид:

$$\frac{1}{C_p(\text{MeO}_x)} = \frac{1}{C_p(\text{MeO}_{1,5})} - \frac{x-1,5}{\frac{1}{2}C_p(\text{O}_2) + (1+k_1)C_p(\text{MeO}_{1,5})}. \quad (2)$$

Совместное решение ур. (1) и (2) позволяет определить координаты границы между 1 и 2 о. т. р.

Использование достаточно хорошо изученных температурных зависимостей теплоемкости компонентов (Cr, O₂, Cr₂O₃) открывает путь к определению C_p дальтонидов и бертоллидов во всей области от Cr до CrO₃.

При проведении расчетов использованы справочные данные [5–14]:

$$C_p(\text{Cr}) = 25,357 + 9,881 \frac{T}{1000} - 3,684 \frac{10^5}{T^2}; \quad (3)$$

$$C_p(\text{Cr}_2\text{O}_3) = 133,770 + 9,211 \frac{T}{1000} - 15,659 \frac{10^5}{T^2}; \quad (4)$$

$$C_p(\text{CrO}_2) = 75,600 + 5,137 \frac{T}{1000} - 8,889 \frac{10^5}{T^2}; \quad (5)$$

$$C_p(\text{CrO}_3) = 102,509 + 6,316 \frac{T}{1000} - 12,301 \frac{10^5}{T^2}. \quad (6)$$

В табл. 1 приведены результаты расчета теплоемкости C_p компонентов и оксидов хрома при различных температурах по ур.(1) и (2) с учетом уравнений (3) – (6). В верхних строках приведены значения, полученные экспериментально, в нижних – рассчитанные теоретически.

Таблица 1

Молярные теплоемкости C_p оксидов хрома при различных температурах

Вещество	T, K							
	298	400	500	600	700	800	900	1000
Cr	24,159	27,007	28,824	30,262	31,522	32,686	33,795	34,870
O ₂	29,378 ±0,008	30,108	31,093	32,093	32,986	33,739	34,363	34,880
CrO	39,986	45,306	48,596	51,148	53,385	55,469	57,478	59,449
½Cr ₂ O ₃	59,450 59,448	63,834 63,830	66,056 66,052	67,473 67,472	68,511 68,512	69,346 69,348	70,063 70,060	70,708 70,706
CrO ₂	67,132 67,132	72,099 72,103	74,613 74,616	76,213 76,214	77,382 77,381	78,321 78,321	79,126 79,120	79,848 79,847
CrO _{2,5}	77,098	82,840	85,730	87,558	88,889	89,960	90,872	91,701
CrO ₃	90,554 90,539	97,347 97,333	100,747 100,735	102,882 102,870	104,420 104,417	105,640 105,664	106,675 106,724	107,595 107,689

Температурная зависимость теплоемкости оксидов, составы которых отвечают границам раздела о.т.р. имеет вид:

$$C_p(\text{CrO}_{x(1-2)}) = 66,975 - 1,164 \frac{T}{1000} - 6,390 \frac{10^5}{T^2}. \quad (7)$$

На рисунке приведены результаты расчетов по ур. (1) и (2) с учетом данных таблицы 2. Песечению прямых отвечает координата x_{1-2} границы раздела 1 и 2 о.т.р.

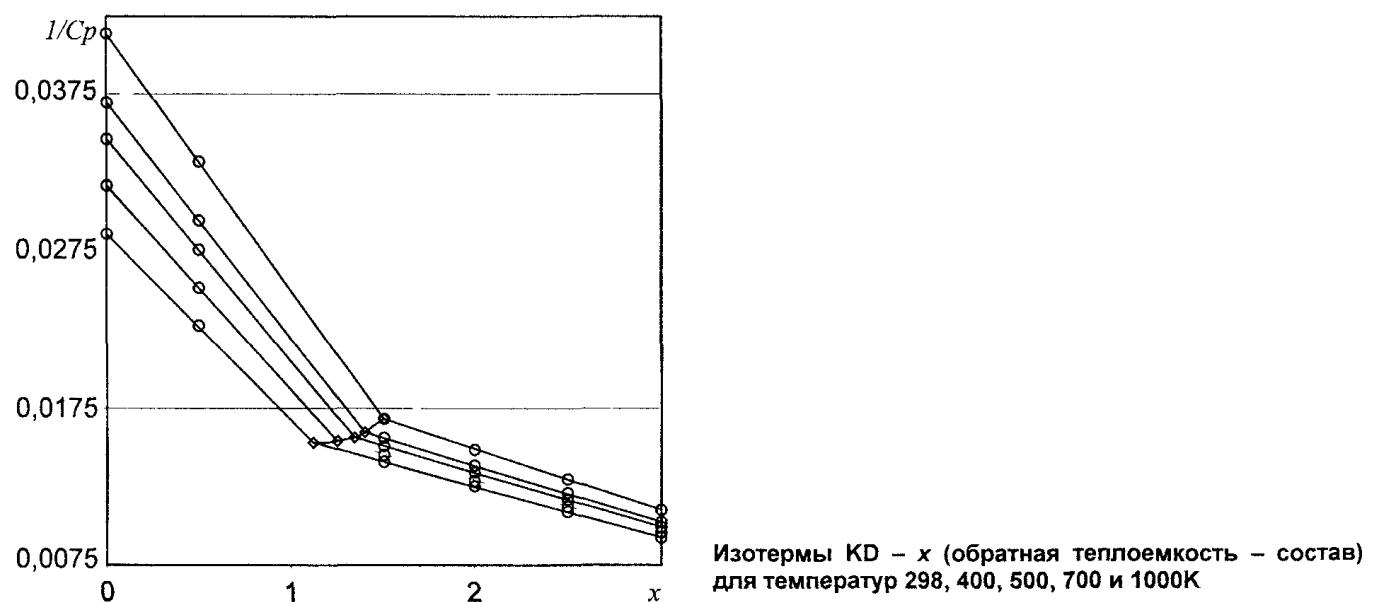


Таблица 2

Теплоемкость оксидов, отвечающих границе областей твердых растворов при различных температурах

Величина	$T, \text{ К}$							
	298	400	500	600	700	800	900	1000
x_{1-2}	1,500	1,406	1,348	1,300	1,255	1,211	1,167	1,123
C_p (ур. 7)	59,432	62,515	63,837	64,502	64,857	65,045	65,138	65,172

Заключение

- Математическая модель, описывающая температурную зависимость теплоемкости нестехиометрических оксидов, проверена на оксидах хрома. Наблюдается хорошее согласие экспериментальных и расчетных величин.
- Определены составы оксидов, соответствующих границам областей твердых растворов при различных температурах на диаграмме $C_p - x$ и найдены их теплоемкости.
- Предсказаны значения теплоемкости оксидов хрома при различных температурах.

Литература

- Рябухин А.Г. Модель расчета стандартных теплоемкостей C_p^0 нестехиометрических соединений // Изв. ЧНЦ УрО РАН. – 2003. – №4(21). – С. 38–42.
- Рябухин А.Г. Расчет молярных теплоемкостей C_p^0 нестехиометрических бинарных соединений (бертоллидов) // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2003. – Вып. 4. – №8(23). – С. 134–141.
- Рябухин А.Г., Стенников М.А. – «Металлургия». – 2003. – Вып. 3. – С. 28–29.
- Рябухин А.Г., Стенников М.А. Расчет стандартных теплоемкостей нестехиометрических оксидов Ti, Zr и Hf // Изв. ЧНЦ УрО РАН. – 2003. – Вып. 4(21). – с. 43–46.
- Рябухин А.Г., Стенников М.А. Расчет стандартных теплоемкостей нестехиометрических оксидов V, Nb и Ta // Изв. ЧНЦ УрО РАН. – 2004. – Вып. 1(22). – с. 87–90.
- Термодинамические свойства индивидуальных веществ/ Под редакцией В.П. Глушко. – М.: Наука, 1978. – Т.1. – кн.2. – 326 с.
- Термодинамические свойства индивидуальных веществ/ Под редакцией В.П. Глушко. – М.: Наука, 1982. – Т4. – кн.2. – 559 с.
- Термические константы веществ/ Под ред. В.П. Глушко. – М.: АН СССР, ВИНИТИ, 1972. – Вып.VI. – Ч.1. – 369 с.
- Термические константы веществ/ Под ред. В.П. Глушко. – М.: АН СССР, ВИНИТИ, 1974. – Вып.VII. – Ч.2. – 343 с.
- Термические константы веществ. Спр. в 10 вып./ Под ред. В. П. Глушко. – М.: АН СССР, ВИНИТИ, вып. VI и VII, чч. I, 1972, 1974, 369 с., 343с.
- Термодинамические свойства индивидуальных веществ. Спр. изд. в 4 т./ Под ред. В.П. Глушко. – М.: Наука, 1978 – 1982.
- Киреев В.А. Методы практических расчетов в термодинамике химических реакций. – М.: Химия, 1970. – 519 с.
- Рябин В.А., Остроумов М.А., Свит Т.Ф. Термодинамические свойства веществ: Спр. – Л.: Химия, 1977. – 389 с.
- Уикс К.Е., Блок Ф.Е. Термодинамические свойства 65 элементов, их оксидов, галогенидов, карбидов и нитридов/ Пер. с англ. – М.: Металлургия, 1965. – 240 с.
- Термодинамические свойства неорганических веществ: Спр./ Под ред. А.П. Зефирова. – М.: Атомиздат, 1965. – 460 с.

Поступила в редакцию 27 июня 2004 г.

**ВЕСТНИК
ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА**
№ 2 (42) 2005

**Серия
«МАТЕМАТИКА, ФИЗИКА, ХИМИЯ»
Выпуск 5**

Издательство Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 23.05.2005. Формат 60×84 1/8. Печать трафаретная.
Усл. печ. л. 19,06. Уч.-изд. л. 19,88. Тираж 210 экз. Заказ 178/39.

Группа МЭНП Издательства. 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.