

Редакционная коллегия

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

БУЛАТОВА М.Г. О решении одной обратной задачи тепловой диагностики.....	3
ВОРОБЬЕВ О.Ю., ТАРАСОВА О.Ю., ОВСЯННИКОВА А.Н. Методы сеточной аппроксимации сложных систем событий	10
ЗАВЬЯЛОВ О.Г., ПАВЛОВА Ю.В. Доказательство необходимого признака существования тонкого слоя между двумя поверхностями.....	16
КАРАЧИК В.В., АНТРОПОВА Н.А. Об одном методе решения уравнения Пуассона	22
КУТУЗОВ А.С. Точная по порядку оценка приближенного решения обратной задачи для уравнения теплопроводности на кольце	30
МЕДВЕДЕВ С.В. О замкнутых подмножествах в u -однородных пространствах первой категории.....	37
МИНАЖДИНОВА Л.А. О сходимости последовательности операторов внутренней суперпозиции.....	42
ТАНАНА В.П., КОЛЕСНИКОВА Н.Ю. Об оптимальном методе решения одной обратной задачи тепловой диагностики	48

Содержание

УХОБОТОВ В.И., ЗАЙЦЕВА О.В. Игровая задача импульсной встречи со смешанным ограничением на управление второго игрока.....	55
ФИЛИППОВ О.В. Прямой метод решения системы линейных алгебраических уравнений на основе вейвлет-разложения.....	61

Физика

ВОРОНЦОВ А.Г., МИРЗОЕВ А.А. Построение потенциала ЕАМ-типа по структурным данным жидкости и кристалла.....	68
ЕЛЮХИНА И.В., КУЗНЕЦОВ Г.Ф. Идентифицируемость высокотемпературных псевдооживленных слоев.....	74
ЛУПИШКО Д.Ф., ЕМЕЛЬЯНЕНКО В.В., БИРЮКОВ Е.Е. Динамическая и физическая эволюция комет: доля астероидов, сближающихся с Землей, кометного происхождения.....	78
СОЛОВЬЕВ А.А., БЕРЕЗИН В.М., ЕРМАКОВА М.А. Постоянная Холла в тонких пленках ГЦК металлов.....	82

Химия

БЕЛАЯ Е.А., ВИКТОРОВ В.В. Массоперенос при взаимодействии мелкодисперсных оксидов $TiO_2 - Cr_2O_3$	86
ЕРЕМЯШЕВ В.Е., БЫКОВ В.Н. ИК спектроскопия и поведение воды в модельных стеклах системы $Na_2SiO_3 - NaAlSi_3O_8$	91
РОТЕРМЕЛЬ М.В., ЧВАНОВА А.Н., КРАСНЕНКО Т.И., ПЕТРОВА С.А., ЗАХАРОВ Р.Г., ВИКТОРОВ В.В. Анализ структурных термических деформаций пированадата кадмия.....	95
СУХАРЕВ Ю.И., НОСОВ К.И. Единая физико-химическая природа колебательного движения в оксигидратных гелях при токовых выплесках и колебательных изменениях динамической вязкости.....	100
ЧВАНОВА А.Н., КРАСНЕНКО Т.И., РОТЕРМЕЛЬ М.В., ВИКТОРОВ В.В. Термическое расширение $Na_2ZnV_2O_7$	112
ЧВАНОВА А.Н., РОТЕРМЕЛЬ М.В., КРАСНЕНКО Т.И., СИВЦОВА О.В., ВИКТОРОВ В.В. Термические свойства фаз системы $Zn_2V_2O_7 - Cu_2V_2O_7$	114
ШТИН С.В., ЛЫКАСОВ А.А. Фазовые равновесия в системе $Fe - Fe_3O_4 - Fe_2GeO_4 - Ge$	118

Математика

О РЕШЕНИИ ОДНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ТЕПЛОВОЙ ДИАГНОСТИКИ¹

М.Г. Булатова

Рассмотрена обратная граничная задача математической физики. Для ее решения использован оптимальный по порядку метод проекционной регуляризации. Для приближенного решения этой задачи получены оценки погрешности.

При тепловой диагностике ракетных двигателей (см. [1]) необходим учет физических свойств, используемых композиционных материалов. Это приводит к необходимости решения обратных задач для уравнения с разрывными коэффициентами. Высокие требования, предъявляемые к точности вычислений, при решении данного класса задач, заставляют разрабатывать оптимальные методы для их решения, а также получать точные оценки погрешности этих методов.

1. Постановка задачи

$$\frac{\partial u_1(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u_1(x,t)}{\partial x^2}; \quad 0 \leq x \leq x_1, \quad t \geq 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_2(x,t)}{\partial t} = \varkappa \frac{\partial^2 u_2(x,t)}{\partial x^2}; \quad x_1 \leq x \leq 1, \quad t \geq 0, \quad (2)$$

где \varkappa – некоторая известная положительная константа.

Предположим, что решения $u_1(x,t)$ и $u_2(x,t)$ удовлетворяют начальным условиям

$$u_1(x,0) = 0; \quad 0 \leq x \leq x_1, \quad (3)$$

$$u_2(x,0) = 0; \quad x_1 \leq x \leq 1, \quad (4)$$

а также граничным условиям

$$u_1(0,t) = f_1(t); \quad t \geq 0, \quad (5)$$

$$u_1(x_1,t) = f_2(t); \quad t \geq 0, \quad (6)$$

и условиям согласования

$$u_1(x_1,t) = u_2(x_1,t); \quad t \geq 0, \quad (7)$$

$$\lambda_1 \frac{\partial u_1(x_1,t)}{\partial x} = \lambda_2 \frac{\partial u_2(x_1,t)}{\partial x}; \quad t \geq 0, \quad (8)$$

где λ_1 и λ_2 некоторые известные положительные константы.

Функцию $u_2(1,t)$ требуется определить.

Задача (1)–(8), следуя [2], является некорректно поставленной. Поэтому предположим, что при $f_{10}(t)$ и $f_{20}(t) \in L_2[0, \infty)$ таких, что

$$\int_0^\infty |f_{20}(t)|^2 dt + \int_0^\infty |f'_{20}(t)|^2 dt \leq r^2, \quad (9)$$

¹ Работа поддержана грантом р_урал_а №07-01-96001

где r – известно, существуют точные решения $u_{10}(x, t)$, $u_{20}(x, t)$ задачи (1)–(8) такие, что $u_{10}(x, t)$, $\frac{\partial u_{10}(x, t)}{\partial t}$, $\frac{\partial u_{10}(x, t)}{\partial x}$, $\frac{\partial^2 u_{10}(x, t)}{\partial x^2} \in C([0, x_1]; L_2[0, \infty))$ и $u_{20}(x, t)$, $\frac{\partial u_{20}(x, t)}{\partial t}$, $\frac{\partial u_{20}(x, t)}{\partial x}$, $\frac{\partial^2 u_{20}(x, t)}{\partial x^2} \in C([x_1, 1]; L_2[0, \infty))$ и

$$\int_0^{\infty} |u_{20}(1, t)|^2 dt + \int_0^{\infty} |u'_{20}(1, t)|^2 dt \leq r_1^2, \quad (10)$$

где r_1 не известно.

Пусть точные значения функций $f_{10}(t)$ и $f_{20}(t)$ нам не известны, а вместо них даны некоторые приближения $f_{1\delta}(t)$, $f_{2\delta}(t) \in L_2[0, \infty)$ и уровень их погрешности $\delta > 0$ такие, что

$$\|f_{1\delta} - f_{10}\| \leq \delta, \quad (11)$$

$$\|f_{2\delta} - f_{20}\| \leq \delta. \quad (12)$$

Требуется, используя исходную информацию $f_{1\delta}$, $f_{2\delta}$, δ и r задачи, определить приближенное решение $u_{2\delta}(1, t)$ задачи (1)–(8) и оценить его отклонение от точного решения.

2. Сведение задачи (1)–(8) на отрезке $[0, x_1]$ к задаче для обыкновенного дифференциального уравнения

Пусть $\hat{H} = L_2[0, \infty) + iL_2[0, \infty)$ где i – мнимая единица, а $L_2[0, \infty)$ – действительное пространство.

На пространстве \hat{H} определим унитарное преобразование F

$$F(u + iv) = \frac{1}{\sqrt{2}} F_c(u) - \frac{i}{\sqrt{2}} F_s(v), \quad (13)$$

где F_c и F_s – косинус и синус преобразования.

Применяя к уравнению (1) преобразование F , определяемое формулой (13), сведем его к уравнению

$$\frac{d^2 \hat{u}_1(x, \tau)}{dx^2} - i\tau \hat{u}_1(x, \tau) = 0; \quad x \in [0, x_1], \tau \geq 0, \quad (14)$$

в котором $\hat{u}_1(x, \tau) = F[u_1(x, t) + iu_2(x, t)]$.

К уравнению (14) добавим условия

$$\hat{u}_1(0, \tau) = \hat{f}_1(\tau); \quad \tau \geq 0 \quad (15)$$

и

$$\hat{u}_1(x_1, \tau) = \hat{f}_2(\tau); \quad \tau \geq 0, \quad (16)$$

где $\hat{f}_1(\tau) = F[f_1(t) + if_2(t)]$, а $\hat{f}_2(\tau) = F[f_2(t) + if_1(t)]$.

Решая задачу (14)–(16), получим, что

$$\hat{u}_1(x, \tau) = a_1(\tau) e^{\mu_0 x \sqrt{\tau}} + b_1(\tau) e^{-\mu_0 x \sqrt{\tau}}; \quad \tau \geq 0, \quad (17)$$

где $\mu_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1+i)$.

Используя условия (15) и (16), определим коэффициенты $a_1(\tau)$ и $b_1(\tau)$

$$a_1(\tau) = \frac{e^{\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}}}{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} - 1} \hat{f}_2(\tau) - \frac{1}{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} - 1} \hat{f}_1(\tau), \quad (18)$$

$$b_1(\tau) = \frac{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}}}{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} - 1} \hat{f}_1(\tau) - \frac{e^{\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}}}{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} - 1} \hat{f}_2(\tau) \quad (19)$$

Из (17)–(19) следует, что

$$\hat{g}_1(\tau) = \frac{\partial \hat{u}_1(x_1, \tau)}{\partial x} = \mu_0 \sqrt{\tau} \left(\frac{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} + 1}{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} - 1} \hat{f}_2(\tau) - \frac{2e^{\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}}}{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} - 1} \hat{f}_1(\tau) \right), \tau \geq 0. \quad (20)$$

Задачу (20) представим в виде двух.

Первая из них, являющаяся сужением задачи (20) на отрезок $0 \leq \tau \leq 1$, корректна, а вторая

$$\hat{g}_1(\tau) = \mu_0 \sqrt{\tau} \left(\frac{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} + 1}{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} - 1} \hat{f}_2(\tau) - \frac{2e^{\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}}}{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} - 1} \hat{f}_1(\tau) \right), \tau \geq 1 \quad (21)$$

является задачей вычисления значений неограниченного оператора.

Из (20) следует, что если $\|\hat{f}_1(\tau)\| \leq 1$ и $\|\hat{f}_2(\tau)\| \leq 1$, то

$$\|\hat{g}_1(\tau)\|_{L_2[0,1]} \leq \frac{4}{\sqrt{2x_1}}; \quad 0 \leq \tau \leq 1. \quad (22)$$

Для решения задачи (21) воспользуемся изометричностью в пространстве \hat{H} преобразования F , определяемого формулой (13).

Из (12) следует, что

$$\|\hat{f}_{20} - \hat{f}_{2\delta}\| \leq \delta, \quad (23)$$

где $\hat{f}_{2\delta}(\tau) = F[f_{2\delta}(t) + if_{2\delta}(t)]$, $\hat{f}_{20}(\tau) = F[f_{20}(t) + if_{20}(t)]$.

Из (9) следует, что для $\hat{g}_1(\tau)$ справедливо соотношение

$$\int_0^{\infty} \tau^2 |\hat{g}_1(\tau)| d\tau \leq r^2 \quad (24)$$

Теперь для решения задачи (21), (23), (24) используем метод проекционной регуляризации, изложенный в [3, с. 41]. Этот метод, для данной задачи, заключается во введении функции $\hat{g}_1^\alpha(\tau)$, определяемой формулой

$$\hat{g}_1^\alpha(\tau) = \begin{cases} \hat{g}_1(\tau), & 1 \leq \tau \leq \alpha \\ 0, & \tau > \alpha, \alpha > 1, \end{cases} \quad (25)$$

в которой параметр α удовлетворяет уравнению

$$\frac{r}{\alpha} = \varepsilon \sqrt{\alpha} \quad (26)$$

$$\text{где } \varepsilon = \frac{\left(1 + e^{-\frac{1}{\sqrt{2}}x_1}\right)^2}{1 - e^{-\sqrt{2}x_1}} \delta.$$

Так как на основании (23) имеем, что при $\tau \geq 1$

$$\left\| \left(\frac{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} + 1}{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} - 1} \hat{f}_{2\delta}(\tau) - \frac{2e^{\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}}}{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} - 1} \hat{f}_{1\delta}(\tau) \right) - \left(\frac{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} + 1}{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} - 1} \hat{f}_2(\tau) - \frac{2e^{\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}}}{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} - 1} \hat{f}_1(\tau) \right) \right\| \leq \varepsilon, \quad (27)$$

то из (24)–(27) следует, что приближенное решение $\hat{g}_{1\varepsilon}^\alpha(\tau)$ задачи (21) определяется формулой

$$\hat{g}_{1\varepsilon}^{\alpha(\varepsilon)}(\tau) = \begin{cases} \hat{g}_{1\varepsilon}(\tau), & 1 \leq \tau \leq \left(\frac{r}{\varepsilon}\right)^{2/3} \\ 0, & \tau > \left(\frac{r}{\varepsilon}\right)^{2/3}, \end{cases} \quad (28)$$

где $\hat{g}_{1\varepsilon}(\tau) = \frac{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} + 1}{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} - 1} \hat{f}_{2\delta}(\tau) - \frac{2e^{\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}}}{e^{2\mu_0 x_1 \sqrt{\tau}} - 1} \hat{f}_{1\delta}(\tau)$.

Теорема, сформулированная в [3] на стр. 43, утверждает, что для функции $\hat{g}_{1\varepsilon}^{\alpha(\varepsilon)}(\tau)$, определенной формулой (28), справедлива оценка

$$\|\hat{g}_{1\varepsilon}^{\alpha(\varepsilon)}(\tau) - \hat{g}_1(\tau)\|_{L_2[1, \infty]} \leq \sqrt{2} r^{1/3} \varepsilon^{2/3}. \quad (29)$$

Если функцию $\hat{g}_{1\varepsilon}^{\alpha(\varepsilon)}(\tau)$ продолжить на всю полуось $[0, \infty)$ формулой

$$\hat{g}_{1\varepsilon}^{\alpha(\varepsilon)}(\tau) = \begin{cases} \hat{g}_{1\varepsilon}(\tau), & 0 \leq \tau \leq \left(\frac{r}{\varepsilon}\right)^{2/3} \\ 0, & \tau > \left(\frac{r}{\varepsilon}\right)^{2/3}, \end{cases} \quad (30)$$

то из (22) и (30) будет следовать, что

$$\|\hat{g}_{1\varepsilon}^{\alpha(\varepsilon)}(\tau) - \hat{g}_1(\tau)\|_{L_2[0, \infty]} \leq \sqrt{2} r^{1/3} \varepsilon^{2/3} + \frac{4\delta}{\sqrt{2} x_1}. \quad (31)$$

3. Решение задачи (1) – (8) на отрезке $[x_1, 1]$

Применяя к уравнению (2) преобразование F , получим

$$\frac{d^2 \hat{u}_2(x, \tau)}{dx^2} - \frac{1}{\varkappa} i\tau \hat{u}_2(x, \tau) = 0; \quad x \in [x_1, 1], \tau \geq 0, \quad (32)$$

где $\hat{u}_2(x, \tau) = F[u_2(x, t) + iu_2(x, t)]$.

Предположим, что

$$\hat{u}_2(x_1, \tau) = \hat{f}_{2\delta}(\tau); \quad \tau \geq 0, \quad (33)$$

а

$$\frac{\partial \hat{u}_2(x_1, \tau)}{\partial x} = \hat{g}_{2\delta}(\tau); \quad \tau \geq 0, \quad (34)$$

где $\hat{g}_{2\delta}(\tau) = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \hat{g}_{1\varepsilon}^{\alpha(\varepsilon)}(\tau)$.

Из формулы (31) следует, что

$$\|\hat{g}_{20} - \hat{g}_{2\delta}\| \leq \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \left[\sqrt{2} r^{1/3} \varepsilon^{2/3} + \frac{4\delta}{\sqrt{2} x_1} \right], \quad (35)$$

где $\hat{g}_{20}(\tau) = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \hat{g}_{10}(\tau)$.

Решая задачу (32)–(34), получим, что

$$\hat{u}_2(x, \tau) = a_2(\tau) e^{\mu_0 x \sqrt{\frac{\tau}{\varkappa}}} + b_2(\tau) e^{-\mu_0 x \sqrt{\frac{\tau}{\varkappa}}}; \quad \tau \geq 0, \quad (36)$$

$$a_2(\tau) e^{\mu_0 x_1 \sqrt{\frac{\tau}{\varkappa}}} + b_2(\tau) e^{-\mu_0 x_1 \sqrt{\frac{\tau}{\varkappa}}} = \hat{f}_{2\delta}(\tau); \quad \tau \geq 0 \quad (37)$$

и

$$\mu_0 \sqrt{\frac{\tau}{\alpha}} a_2(\tau) e^{\mu_0 x_1 \sqrt{\frac{\tau}{\alpha}}} - \mu_0 \sqrt{\frac{\tau}{\alpha}} b_2(\tau) e^{-\mu_0 x_1 \sqrt{\frac{\tau}{\alpha}}} = \hat{g}_{2\delta}(\tau); \quad \tau \geq 0. \quad (38)$$

Решая задачу (36)–(38), сведем ее к задаче вычисления значений неограниченного оператора

$$\begin{pmatrix} \operatorname{ch} \mu_0(1-x_1) \sqrt{\frac{\tau}{\alpha}} & \frac{1}{\mu_0 \sqrt{\frac{\tau}{\alpha}}} \operatorname{sh} \mu_0(1-x_1) \sqrt{\frac{\tau}{\alpha}} \\ \mu_0 \sqrt{\frac{\tau}{\alpha}} \operatorname{sh} \mu_0(1-x_1) \sqrt{\frac{\tau}{\alpha}} & \operatorname{ch} \mu_0(1-x_1) \sqrt{\frac{\tau}{\alpha}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{f}_{2\delta}(\tau) \\ \hat{g}_{2\delta}(\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{u}_2(\tau) \\ \hat{v}_2(\tau) \end{pmatrix}, \quad (39)$$

где $\hat{u}_2(\tau) = \hat{u}_2(1, \tau)$, а $\hat{v}_2(\tau) = \frac{\partial \hat{u}_2(1, \tau)}{\partial x}$ или

$$T \cdot \begin{pmatrix} \hat{f}_{2\delta} \\ \hat{g}_{2\delta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{u}_2 \\ \hat{v}_2 \end{pmatrix}, \quad (40)$$

где неограниченный оператор T действует из пространства $\hat{H} \times \hat{H}$ в $\hat{H} \times \hat{H}$.

Используя соответствующий унитарный оператор

$$Q = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (e^{2a} + 1) & \frac{1}{\mu_0 \sqrt{\frac{\tau}{\alpha}}} (e^{-2a} - 1) \\ -\mu_0 \sqrt{\frac{\tau}{\alpha}} (e^{2a} - 1) & (e^{-2a} + 1) \end{pmatrix} \quad (41)$$

в пространстве $\hat{H} \times \hat{H}$, приведем оператор T к диагональному виду T_1

$$T_1 = \begin{pmatrix} |e^a| & 0 \\ 0 & |e^{-a}| \end{pmatrix}, \quad (42)$$

где $a = \mu_0(1-x_1) \sqrt{\frac{\tau}{\alpha}}$, а $|e^a|$ и $|e^{-a}|$ модули чисел e^a и e^{-a} .

Таким образом, задачу (40) сведем к задаче

$$T_1 \begin{pmatrix} \tilde{f}_{2\delta} \\ \tilde{g}_{2\delta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{u}_2 \\ \hat{v}_2 \end{pmatrix}, \quad (43)$$

где $\begin{pmatrix} \tilde{f}_{2\delta} \\ \tilde{g}_{2\delta} \end{pmatrix} = Q^* \begin{pmatrix} \hat{f}_{2\delta} \\ \hat{g}_{2\delta} \end{pmatrix}$, Q^* – оператор, сопряженный Q , определяемому формулой (41), а T_1 – определен формулой (42).

Так как Q^* унитарный оператор, то из (23) и (35) следует, что

$$\|\tilde{f}_{2\delta} - \tilde{f}_{20}\| \leq \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \left[\sqrt{2} r^{1/3} \varepsilon^{2/3} + \frac{4\delta}{\sqrt{2} x_1} \right] \quad (44)$$

и

$$\|\tilde{g}_{2\delta} - \tilde{g}_{20}\| \leq \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \left[\sqrt{2} r^{1/3} \varepsilon^{2/3} + \frac{4\delta}{\sqrt{2} x_1} \right], \quad (45)$$

где
$$\begin{pmatrix} \tilde{f}_{20} \\ \tilde{g}_{20} \end{pmatrix} = Q^* \begin{pmatrix} \hat{f}_{20} \\ \hat{g}_{20} \end{pmatrix}.$$

Из (42) следует, что оператор T_1 может быть представлен в виде суммы

$$T_1 = T_1' + T_1'',$$

где

$$T_1' \cdot \begin{pmatrix} \tilde{f}_{2\delta} \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{u}_2 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{46}$$

и

$$T_1'' \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ \tilde{g}_{2\delta} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \hat{v}_2 \end{pmatrix}.$$

Из (10) следует, что

$$\left\| \hat{u}_{20}(\tau) \sqrt{1 + \left(\frac{\tau}{\mathfrak{a}}\right)^2} \right\|_{\hat{H}} \leq r_1. \tag{47}$$

Из формулы (47) определим оператор вложения

$$B^{-1} \hat{u}_{20}(\tau) = \sqrt{1 + \left(\frac{\tau}{\mathfrak{a}}\right)^2} \hat{u}_{20}(\tau), \tag{48}$$

а задачу (46) перепишем в виде операторного уравнения

$$A_1 \hat{u}_2(\tau) = e^{-\frac{1}{\sqrt{2}}(1-x_1)\sqrt{\frac{\tau}{\mathfrak{a}}}} \hat{u}_2(\tau) = \tilde{f}_{2\delta}. \tag{49}$$

Обозначим через $\omega_1(\varepsilon, r_1)$ модуль непрерывности оператора A_1^{-1} , определяемого формулой (42) на множестве $\hat{M}_{r_1} = BS_{r_1}$, где $S_{r_1} = \{z : z \in \hat{H}, \|z\| \leq r_1\}$, а оператор B определен формулой (41).

Тогда из [4] следует, что

$$\omega_1(\varepsilon, r_1) \sim \ln^{-2} \left(\frac{1}{\varepsilon} \right). \tag{50}$$

Для решения уравнения (49) используем метод проекционной регуляризации, предложенный в [4].

Для этого положим $\varepsilon_1 = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} \left[\sqrt{2} r_1^{1/3} \varepsilon^{2/3} + \frac{4\delta}{\sqrt{2} x_1} \right]$ и при условии $\|\tilde{f}_{2\delta}\| \leq 3\varepsilon_1$

$$\hat{u}_{2\delta}(\tau_0) \equiv 0,$$

а при $\|\tilde{f}_{2\delta}\| > 3\varepsilon_1$, определим функцию $\tilde{f}_{2\delta}^{\bar{\alpha}(\varepsilon_1)}(\tau)$ формулой

$$\tilde{f}_{2\delta}^{\bar{\alpha}(\varepsilon_1)}(\tau) = \begin{cases} \tilde{f}_{2\delta}(\tau) & \text{при } \tau \leq \bar{\alpha}(\varepsilon_1) \\ 0 & \text{при } \tau > \bar{\alpha}(\varepsilon_1), \end{cases}$$

где $\bar{\alpha}(\varepsilon_1)$ определим из условия

$$\int_{\bar{\alpha}(\varepsilon_1)}^{\infty} |\tilde{f}_{2\delta}(\tau)|^2 d\tau = 9\varepsilon_1^2.$$

Приближенное решение $\hat{u}_{2\delta}(\tau)$ уравнения (49) определим формулой

$$\hat{u}_{2\delta}(\tau) = e^{\frac{1}{\sqrt{2}}(1-x_1)\sqrt{\frac{\tau}{\alpha}}} \tilde{f}_{2\delta}^{\bar{\alpha}(\varepsilon_1)}(\tau). \quad (51)$$

Из (49) – (51) следует существование числа l_1 такого, что

$$\|\hat{u}_{2\delta} - \hat{u}_{20}\| \leq l_1 \ln^{-2}\left(\frac{1}{\varepsilon_1}\right). \quad (52)$$

Окончательно решение задачи (1)–(8) будет иметь вид

$$u_{2\delta}(1, t) = \operatorname{Re}\left(F^{-1}\left[\hat{u}_{2\delta}(\tau)\right]\right), \quad (53)$$

где F^{-1} – отображение, обратное к F , определяемому формулой (13).

Из (52) и (53) следует, что

$$\|u_{2\delta}(1, t) - u_{20}(1, t)\| \leq l_1 \ln^{-2}\left(\frac{1}{\varepsilon_1}\right).$$

Литература

1. Исаков, Г.Н. Определение характеристик тонкослойных теплозащитных покрытий из решения обратных задач тепло и массопереноса / Г.Н. Исаков, А.Я. Кузин, В.Н. Савельев, Ф.В. Ермолаев // Физика горения и взрыва. – 2003. – Т. 39, № 5. – С. 86–96.
2. Алифанов, О.М. Обратные задачи теплообмена / О.М. Алифанов. – М.: Машиностроение, 1988. – 279 с.
3. Танана, В.П. Методы решения операторных уравнений / В.П. Танана. – М.: Наука, 1981. – 160 с.
4. Танана, В.П. Об оптимальности по порядку метода проекционной регуляризации при решении обратных задач / В.П. Танана // Сиб. журнал инд. математики. – 2004. – Т. 7, № 2. – С. 117–132.

Поступила в редакцию 11 мая 2007 г.

МЕТОДЫ СЕТОЧНОЙ АППРОКСИМАЦИИ СЛОЖНЫХ СИСТЕМ СОБЫТИЙ

О.Ю. Воробьев, О.Ю. Тарасова, А.Н. Овсянникова

Представлен вновь введенный метод сеточной аппроксимации неизвестного распределения множества случайных событий.

Введение

Ввиду большого числа событий в реальных статистических системах, возникает трудность определения состояний, в которых может оказаться система. Один из способов преодоления трудностей подобного рода заключается в отыскании сеточного распределения состояния системы, определенного на введенной сетке и близкого к искомому неизвестному распределению. Матричные модели маркетинга [1] натолкнули на идею методов аппроксимации распределений, аналогичных сеточным методам решения дифференциальных уравнений.

Постановка задачи

Существо сеточного метода состоит в следующем: вместо исходного пространства элементарных событий вводится его сеточный аналог. Эта сеточная модель описывается вероятностями, которые определены только на событиях сетки. Неизвестные распределения, т.е. законы, в соответствии с которыми эволюционирует пространство элементарных событий, заменяется соответствующими сеточными аналогами. В итоге исходная задача заменяется, или, как говорят, аппроксимируется системой сеточных распределений – *сеточной схемой*. Другими словами, на аппроксимируемое множество событий «набрасывается сетка» с целью попытаться представить, как ведут себя «неизвестные» события из аппроксимируемого множества в пределах «известных ячеек», роль которых будет предоставлено исполнять событиям-терраскам, образующим сетку.

Основные понятия эвентологии и теории вероятностей

Эвентология – новое направление, возникшее в рамках теории вероятностей и изучающее распределение множеств событий, структуры зависимостей множеств событий [2].

Определение 1.1. *Вероятностным пространством* называется тройка (Ω, F, P) , где Ω – пространство элементарных событий, F – алгебра событий и P – вероятность, определенная на элементах алгебры F – случайных событиях $x, y, \dots \in F$.

Определение 1.2. Конечное множество избранных событий $X \in F$, выбранных из алгебры вероятностного пространства (Ω, F, P) и состоящее из $N = |X|$ событий, называется *множеством случайных событий*.

Определение 1.3. Множество случайных событий X порождает различные наборы так называемых *событий-террасок*, среди которых есть события-терраски для $X \subseteq X$ в форме пересечения:

$$\text{ter}(X) = \bigcap_{x \in X} x \bigcap_{x \in X^c} x^c.$$

Определение 1.4. Два случайных события $x, y \in X$ ($x \neq \emptyset, y \neq \emptyset$) называются *вложенными*, если между ними возможны только два отношения

$$x \cap y = \begin{cases} x, \\ y, \end{cases}$$

то есть одно из этих событий вложено в другое: $x \subseteq y$ или $y \subseteq x$.

Сетка событий, или эвентологическая сетка (Э-сетка)

Начальным этапом построения *сеточной схемы* является замена исходного пространства элементарных событий некоторой сеткой событий, образующих его разбиение.

Определение 2.1. *Эвентологическая сетка (Э-сетка)* – это множество $S \subset F$ непересекающихся случайных событий, выбранных из алгебры F вероятностного пространства (Ω, F, P) и образующих разбиение пространства элементарных событий Ω .

Э-сетка S (сеточное множество случайных событий S , сеточное эвентологическое распределение множества S) определена тогда и только тогда, когда:

- 1) выбрано множество $S \subset F$ непересекающихся случайных событий, образующих разбиение $\Omega = \sum_{s \in S} s$;
- 2) задан набор вероятностей $q(s) = \mathbf{P}(s)$, $s \in S$.

Для «одномерной» задачи простейшим примером Э-сетки является равновероятное разбиение пространства элементарных событий на N равновероятных событий, вероятность которых равна $1/N$ (равновероятная Э-сетка). Равновероятные события Э-сетки называются Э-террасками сетки (Э-узлами сетки), а их вероятности называют также Э-шагами сетки. Совокупность Э-террасок образует множество событий, где определены Э-сеточные распределения.

Определение 2.2. Эвентологической сеткой n -го порядка S^n пространства элементарных событий Ω называется пересечение по Минковскому разбиений $A^1, \dots, A^n \subseteq F$:

$$S^n = \left(\bigcap_{i=1}^n A^i \right) = \left\{ \bigcap_{i=1}^n a^i : a^i \in A^i, i = 1, \dots, n \right\}.$$

Элементы Э-сетки – события-терраски вида

$$\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} = \bigcap_{i=1}^n a^i \subseteq \Omega$$

– называются Э-ячейками Э-сетки S^n .

Ясно, что

$$\Omega = \sum_{a^1 \in A^1} \dots \sum_{a^n \in A^n} \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} = \sum_{\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} \in S^n} \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}$$

– Э-ячейки образуют разбиение пространства элементарных событий Ω .

Таким образом, Э-сетка имеет вид:

$$S^n = \left\{ \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}, a^i \in A^i, i = 1, \dots, n \right\}.$$

Несмотря на кажущуюся простоту, вопрос о выборе Э-сетки заслуживает внимания. С одной стороны, количество событий-террасок желательно брать большим, т.е. пользоваться мелкими, подробными Э-сетками. Точнее передавая при этом область изменения Э-аргумента, мы интуитивно рассчитываем лучше аппроксимировать искомое Э-распределение сеточными распределениями. С другой стороны, практические соображения, и в первую очередь ограниченность быстродействия и объема памяти компьютеров, заставляет обращаться к Э-сеткам со сравнительно небольшим числом Э-террасок. Решением этой проблемы часто служат *неравновероятные* Э-сетки. Если имеется информация об Э-распределении, например, известно «расположение» в пространстве элементарных событий некоторых его особенностей, для «разрешения» которых необходима мелкая Э-сетка, то можно, не увеличивая общего числа террасок, сгустить сетку в «окрестности» этих особенностей, а в «гладкой» области распределения сетку сделать редкой.

Определение 2.3. X – аппроксимирующим S^n -сеточным отображением называется отображение $\varphi: S^n \rightarrow 2^X$, которое на Э-ячейке

$$\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} = \bigcap_{i=1}^n a^i \in S^n$$

принимает значение

$$\varphi(\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) = \{x \in X : x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} \neq \emptyset\},$$

которое сокращенно обозначается

$$\varphi(\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) = X_{a^1 \dots a^n} \in 2^X.$$

Определение 2.4. S^n – аппроксимацией множества событий X называется множество событий

$$X^\varphi = \{x^\varphi : x \in X\},$$

где каждое событие

$$x^\varphi = \sum_{x \in \varphi} \left(x \cap \text{ter}_{a^1 \dots a^n} \right) \quad (1)$$

называется S^n -аппроксимацией события $x \in X$.

Событие-терраску будем обозначать

$$\text{ter}^\varphi(X) = \bigcap_{x \in X} x^\varphi \bigcap_{x \in X^c} (x^\varphi)^c, \quad X \subseteq X. \quad (2)$$

Приведем примеры X -аппроксимирующего S^2 отображения с различной степенью ошибки:

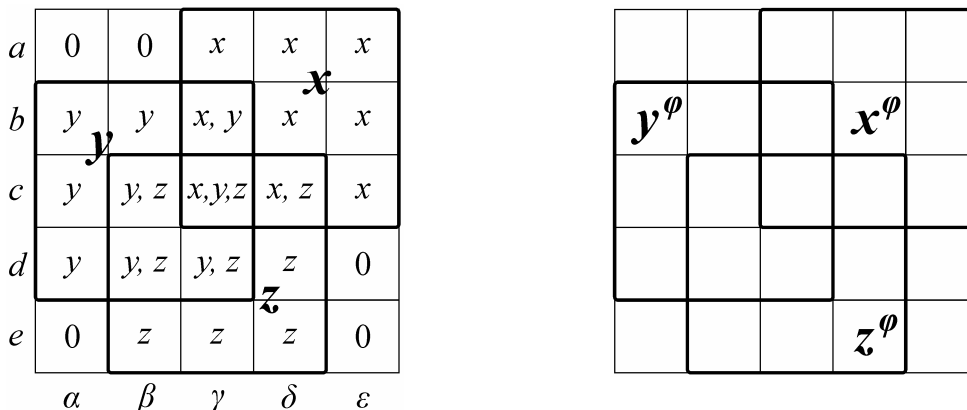


Рис. 1. Эвентологическая сетка второго порядка $S^2 = \{a, b, c, d, e\}(\cap)\{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon\}$, аппроксимирующая исходное Э-распределение триплета событий $X = \{x, y, z\}$ с нулевой ошибкой (слева). Э-сеточная аппроксимация $X^\varphi = \{x^\varphi, y^\varphi, z^\varphi\}$ на Э-ячейках (справа)

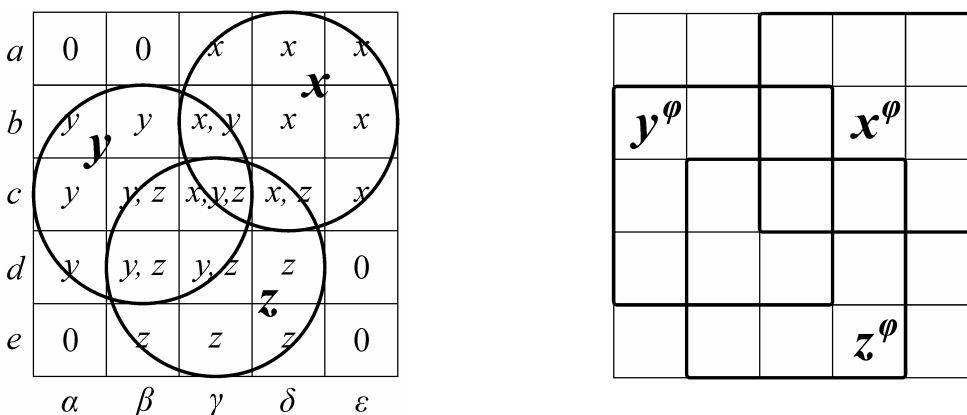


Рис. 2. Эвентологическая сетка второго порядка $S^2 = \{a, b, c, d, e\}(\cap)\{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon\}$, аппроксимирующая исходное Э-распределение триплета событий $X = \{x, y, z\}$ с некоторой ошибкой (слева). Э-сеточная аппроксимация $X^\varphi = \{x^\varphi, y^\varphi, z^\varphi\}$ на Э-ячейках (справа)

Виды Э-сеточной аппроксимации

Точность Э-сеточной аппроксимации Э-распределений определяется *структурой локальной зависимости* аппроксимируемого множества событий, которая характеризуется отношением структур зависимостей двух множеств событий, участвующих в Э-сеточной аппроксимации: Э-сетки S^n и аппроксимируемого множества X .

Рассмотрим три вида Э-сеточной аппроксимации, каждый из которых справедлив в рамках одного из трех предположений о локальной структуре зависимости аппроксимируемого множества событий X : *вложенной, независимой и наименее пересекающейся*.

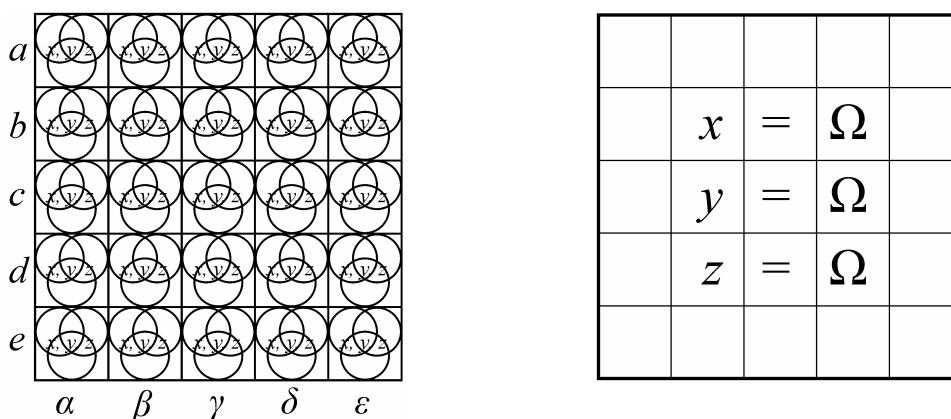


Рис. 3. Эвентологическая сетка второго порядка $S^2 = \{a, b, c, d, e\} \cap \{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \epsilon\}$, аппроксимирующая исходное Э-распределение триплета событий $X = \{x, y, z\}$ с наибольшей ошибкой (слева).

Э-сеточная аппроксимация $X^\varphi = \{\Omega, \Omega, \Omega\}$ на Э-ячейках (справа)

Определение 3.1. Множество событий X имеет локально вложенную структуру относительно Э-сетки S^n , если для любой Э-ячейки $\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} = \bigcap_{i=1}^n a^i \in S^n$ и любого события $x \in X_{a^1 \dots a^n}$:

$$x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} = \begin{cases} \emptyset, \\ \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}, \end{cases}$$

т.е. либо $\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}$ содержится в x , либо не пересекается с ним.

Из этого определения следуют два свойства:

- 1) $\bigcup_{x \in X_{a^1 \dots a^n}} (x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) = \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}$,
- 2) события $x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}$, где $x \in X_{a^1 \dots a^n}$, равновероятны.

Определение 3.2. Множество событий X имеет локально наименее пересекающуюся структуру относительно Э-сетки S^n , если для любой Э-ячейки $\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} \in S^n$ и любого множества событий $X_{a^1 \dots a^n} \subseteq X$:

- 1) $\sum_{x \in X_{a^1 \dots a^n}} (x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) = \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}$,
- 2) события $x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}$, где $x \in X_{a^1 \dots a^n}$, равновероятны.

Определение 3.3. Множество событий X имеет локально независимую структуру относительно Э-сетки S^n , если для любой Э-ячейки $\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} \in S^n$ и любого множества событий $X_{a^1 \dots a^n} \subseteq X$:

- 1) $\bigcup_{x \in X_{a^1 \dots a^n}} (x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) = \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}$,
- 2) события $x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}$, где $x \in X_{a^1 \dots a^n}$, равновероятны,
- 3) события $x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}$, где $x \in X_{a^1 \dots a^n}$, независимы в совокупности.

Теорема 3.1. Эвентологическое распределение S^n -аппроксимации множества событий X

$$p^\varphi(X) = \mathbf{P}(\text{ter}^\varphi(X)), \quad X \subseteq X$$

принимает один из следующих видов:

1) для локально вложенной структуры множества событий X :

$$p^\varphi(X) = \sum_{X \subseteq \varphi(\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}})} \mathbf{P}(\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}), \quad X \subseteq X;$$

2) для локально наименее пересекающейся структуры множества событий X :

$$p^\varphi(X) = \sum_{X \subseteq \varphi(\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}})} \frac{1}{|X_{a^1 \dots a^n}|} \mathbf{P}(\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}), \quad X \subseteq X;$$

3) для локально независимой структуры множества событий X :

$$p^\varphi(X) = \sum_{X \subseteq \varphi(\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}})} \left(\mathbf{P}(x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) \right)^{|X|} \left(\mathbf{P}(\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) - \mathbf{P}(x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) \right)^{|X^c|}, \quad X \subseteq X,$$

где $\left(\mathbf{P}(x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) \right) = 1 - \left(1 - \mathbf{P}(\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) \right)^{1/n}$.

Доказательство. Очевидно, что

$$p^\varphi(X) = \mathbf{P} \left(\sum_{\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} \in S^n} \left(\text{ter}^\varphi(X) \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} \right) \right) = \sum_{\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} \in S^n} \mathbf{P} \left(\text{ter}^\varphi(X) \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} \right). \quad (3)$$

Подставляя (1) в (2), получаем

$$\begin{aligned} \text{ter}^\varphi(X) &= \bigcap_{x \in X} x^\varphi \bigcap_{x \in X^c} (x^\varphi)^c = \\ &= \bigcap_{x \in X} \left(\sum_{x \in \varphi(\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}})} (x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) \right) \bigcap_{x \in X^c} \left(\sum_{x \in \varphi(\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}})} (x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) \right)^c = \\ &= \bigcap_{x \in X} \left(\sum_{x \in \varphi(\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}})} (x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) \right) \bigcap_{x \in X^c} \left(\sum_{x \in \varphi(\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}})} (x^c \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) \right). \end{aligned}$$

Используя полученное выражение для $\text{ter}^\varphi(X)$, получаем

$$\text{ter}^\varphi(X) \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} = \bigcap_{x \in X} (x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) \bigcap_{x \in X^c} (x^c \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}})$$

или в других обозначениях

$$\text{ter}^\varphi(X) \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} = \bigcap_{x \in X} (x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) \bigcap_{x \in X^c} (x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}})^{c'}$$

где $x^{c'} = \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} \setminus (x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}})$ – дополнение x до $\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} \in S^n$, а $x^c = \Omega \setminus (x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}})$ – дополнение x до Ω .

Таким образом, выражение под знаком суммы в (3) можно записать в виде

$$\mathbf{P} \left(\bigcap_{x \in X} (x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) \bigcap_{x \in X^c} (x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}})^{c'} \right),$$

а саму формулу (3)

$$\begin{aligned} p^\varphi(X) &= \sum_{\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} \in S^n} \mathbf{P} \left(\text{ter}^\varphi(X) \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} \right) = \\ &= \sum_{\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} \in S^n} \mathbf{P} \left(\bigcap_{x \in X} (x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}) \bigcap_{x \in X^c} (x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}})^{c'} \right), \quad X \subseteq X \end{aligned} \quad (4)$$

Формула (4) – эвентологическое распределение S^n -аппроксимации множества событий X , имеющего произвольную локальную структуру. Используя формулу (4), можно записать формулы для эвентологического распределения S^n -аппроксимации множества событий X , имеющего локально вложенную, локально наименее пересекающуюся и локально независимую структуру.

Например, рассмотрим множество X , имеющего локально наименее пересекающуюся структуру. По определению локально наименее пересекающейся структуры, события $x \cap \text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}$, где $x \in \varphi(\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}})$ не пересекаются и имеют одинаковую вероятность. Поэтому эвентологическое распределение S^n -аппроксимации множества событий X с локально наименее пересекающейся структурой можно записать в виде:

$$p^\varphi(X) = \sum_{X \subseteq \varphi(\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}})} \frac{1}{|\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}|} \mathbf{P}(\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}}), \quad X \subseteq X,$$

где суммирование ведется по всем $\text{ter}_{\{a^1 \dots a^n\}} \in S^n$, содержащим $X \subseteq X$.

Применение полученных результатов

В качестве аппроксимируемого множества X рассмотрим множество стратегий, предлагаемых компанией Артур Д. Литтл [1]. Распределение множества стратегий неизвестно, поэтому будем использовать метод сеточной аппроксимации для нахождения этого распределения.

В классическом изложении маркетинговой модели ADL/LC принцип построения матрицы ADL подсказывает вид эвентологической сетки. Пересечение двух множеств событий – четырех событий жизненного цикла отрасли и пяти событий его конкурентного положения образуют эвентологическую сетку второго порядка $S^2 = \{a, b, c, d\}(\cup)\{\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon\}$. Каждой ячейке сетки соответствует набор стратегий из множества базовых стратегий, предлагаемых специалистами ADL в качестве руководства к действию. Сделав предположения о локальной структуре зависимости аппроксимируемого множества стратегий X (например, на основе анализа этих стратегий специалистами маркетинга), получим эвентологическое распределение S^2 -аппроксимации множества событий X .

Заключение

В работе получены следующие результаты:

1. Определены понятия эвентологической теории сеточных методов: Э-сетки, X -аппроксимирующего S^n сеточного отображения, S^n -аппроксимации множества событий.
2. Определены три вида локальных структур зависимости.
3. Сформулирована и доказана теорема об эвентологическом распределении S^n -аппроксимации множества событий X для различных локальных структур зависимости этого множества.

Литература

1. Ефремов, В.С. Классические модели стратегического анализа и планирования: модель ADL/LC / В.С. Ефремов // Менеджмент в России и за рубежом. М.: Финпресс. – 1998. – № 1 (<http://www.cfin.ru/press/managment/1998-1/09.shtml>).
2. Воробьев, О.Ю. Введение в эвентологию / О.Ю. Воробьев – Красноярск: КрасГУ, ИВМ СО РАН, 2005. – 512 с.
3. <http://www.r-events.narod.ru>

Поступила в редакцию 2 апреля 2007 г.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО НЕОБХОДИМОГО ПРИЗНАКА СУЩЕСТВОВАНИЯ ТОНКОГО СЛОЯ МЕЖДУ ДВУМЯ ПОВЕРХНОСТЯМИ

О.Г. Завьялов, Ю.В. Павлова

Рассмотрен метод построения тонкого слоя между двумя поверхностями. Сформулированы необходимые условия для формирования тонкого слоя между двумя поверхностями. Доказано, что если одна из поверхностей эллиптическая, то такой же должна быть другая поверхность. Если же одна из поверхностей эллиптическая, а другая поверхность гиперболическая, то отношение гауссовых кривизн будет отрицательным и условие существования тонкого слоя между поверхностями не будет выполняться.

1. Введение

Одним из важных вопросов в теории смазки является вопрос формирования тонкого слоя между двумя поверхностями. Этот вопрос остается важным при решении задачи Капицы о качении шара по поверхности, при рассмотрении взаимодействия клина и иглы с деформируемой поверхностью. В приведенной работе формулируются и доказываются необходимые условия формирования тонкого слоя между двумя поверхностями.

2. Постановка задачи и вывод необходимого условия для формирования тонкого слоя

Рассмотрим один из методов построения тонкого слоя между двумя поверхностями.

Пусть задана поверхность с уравнением

$$\vec{r} = \vec{r}(x^1, x^2). \quad (1)$$

Это может быть сфера единичного радиуса с центром в точке O . Определим единичный вектор нормали к поверхности в точке A

$$\vec{n} = \vec{n}(x^1, x^2) \quad (2)$$

и построим вектор, отложенный от центра сферы (рис. 1).

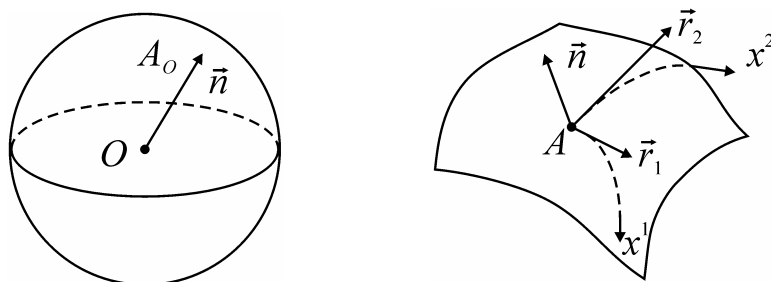


Рис. 1

Касательные плоскости, построенные в точке A поверхности и в точке A_0 сферы, будут параллельными. Направляющими векторами для касательной плоскости поверхности в точке A будут базисные векторы

$$\vec{r}_i = \frac{d\vec{r}}{\partial x^i}, \quad (3)$$

а для сферической поверхности выбраны векторы

$$\vec{n}_i = \frac{d\vec{r}}{\partial x^i}. \quad (4)$$

Система векторов \vec{r}_i ($i = 1, 2$) компланарна системе векторов ($i = 1, 2$), то есть будут справедливы следующие линейные соотношения:

$$\vec{n}_i = \sum_{k=1}^2 m_i^k \vec{r}_k. \quad (5)$$

Умножив равенство (5) на вектор \vec{r}_j скалярно, найдем

$$\vec{n}_i \cdot \vec{r}_j = \sum_{k=1}^2 m_i^k \vec{r}_k \cdot \vec{r}_j = \sum_{k=1}^2 m_i^k q_{kj}. \quad (6)$$

Из равенства [1]

$$\vec{n}_i \cdot \vec{r}_j = -b_{ij}, \quad (7)$$

получим

$$-b_{ij} = \sum_{k=1}^2 m_i^k q_{kj} = m_{ij}. \quad (8)$$

С учетом (8) приходим к формуле Вейнгартена

$$\vec{n}_i = -\sum_{k=1}^2 b_i^k \vec{r}_k. \quad (9)$$

Компоненты

$$\gamma_{ij} = \vec{n}_i \cdot \vec{n}_j, \quad (10)$$

являются компонентами метрического тензора сферы. Квадрат линейного элемента, то есть первая квадратичная форма сферы будет такой:

$$\delta s_0^2 = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \gamma_{ij} \delta x^i \delta x^j. \quad (11)$$

Коэффициенты (10) можем записать в виде

$$\gamma_{ij} = \sum_{k=1}^2 \sum_{l=1}^2 b_i^k b_j^l q_{kl} = \sum_{k=1}^2 b_i^k b_{kj}. \quad (12)$$

Для поверхности были введены два тензора с компонентами g_{ij} и b_{ij} . Построим третий тензор с компонентами γ_{ij} , причем согласно (12), компоненты вновь построенного тензора являются сверткой тензора с компонентами b_{ij} , при этом

$$\gamma_{ij} = \gamma_{ji} \quad (13)$$

Таким образом, имеем

$$\gamma_{ij} - 2Hb_{ij} + Kq_{ij} = 0, \quad (14)$$

где H, K – средняя и полная кривизна поверхности. Теперь возьмем вторую поверхность с уравнением

$$\vec{R} = \vec{R}(y^1, y^2). \quad (15)$$

Единичный вектор нормали второй поверхности обозначим

$$\vec{N} = \vec{N}(y^1, y^2). \quad (16)$$

Базисные векторы поверхности равны:

$$\vec{R}_i = \frac{\partial \vec{R}}{\partial y_i} \quad (i = 1, 2). \quad (17)$$

При смещении по некоторой кривой из точки B в точку B' вектор \vec{N} имеет приращение $\delta \vec{N}$ (рис. 2), при этом касательная плоскость повернется на угол $\delta\varphi$, равный

$$\delta\varphi = |\delta \vec{N}|, \quad (18)$$

отсюда следует, что квадрат $\delta\varphi^2$ равен

$$\delta\varphi^2 = |\delta \vec{N}|^2 = \delta \vec{N} \cdot \delta \vec{N}. \quad (19)$$

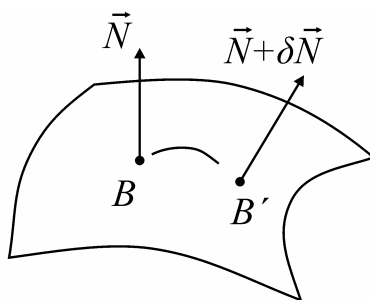


Рис. 2

Вектор $\delta \vec{N}$ разложим по базисным векторам \vec{R}_i

$$\delta \vec{N} = \sum_{i=1}^2 R_i \delta y^i \quad (20)$$

Базисные вектора \vec{R}_i компланарны векторам \vec{N}_i

$$\vec{N}_i = \sum_{k=1}^2 M_i^k \vec{r}_n, \quad (21)$$

так что разложение (20) можно заменить разложением такого вида:

$$\delta \vec{N} = \sum_{i=1}^2 \vec{N}_i \delta y^i. \quad (22)$$

Третья квадратичная форма поверхности запишется

$$\delta \varphi^2 = \sum_{i=1}^2 \sum_{j=1}^2 \Gamma_{ij} \delta y^i \delta y^j, \quad (23)$$

где $\Gamma_{ij} = \vec{N}_i \cdot \vec{N}_j$ ($i, j = 1, 2$).

Итак, каждая из рассматриваемых поверхностей имеет три квадратичные формы, причем для второй поверхности их можно записать в виде:

$$\delta S^2 = \delta \vec{R}^2, \quad \delta l = -\frac{1}{2} \delta \vec{R} \cdot \delta \vec{N}, \quad \delta \varphi^2 = \delta \vec{N} \cdot \delta \vec{N}. \quad (24)$$

Первая квадратичная форма определяет квадрат расстояния между двумя выбранными точками B и B' по некоторой кривой поверхности; вторая – расстояние от точки B' до касательной плоскости в точке B ; третья – квадрат угла поворота между касательными плоскостями в точках B и B' .

Вернемся к первой поверхности. Вектор $\delta \vec{n}$ может быть получен, если к вектору $\delta \vec{r}$ применить линейный оператор L

$$\delta \vec{n} = L \delta \vec{r}. \quad (25)$$

Линейный оператор (25) построим так, чтобы он переводил неколлинеарные векторы \vec{r}_1 и \vec{r}_2 в векторы \vec{n}_1 и \vec{n}_2 соответственно

$$L \vec{r}_1 = \vec{n}_1, \quad L \vec{r}_2 = \vec{n}_2. \quad (26)$$

Линейный оператор L оказывается самосопряженным, так как справедливо равенство

$$\vec{r}_1 \cdot \vec{n}_2 = \vec{r}_1 \cdot L \vec{r}_2 = \vec{r}_2 \cdot L \vec{r}_1 = \vec{r}_2 \cdot \vec{n}_1. \quad (27)$$

Запишем теперь равенство

$$\frac{\delta \vec{n}}{\delta S} = L \left(\frac{\delta \vec{r}}{\delta S} \right). \quad (28)$$

Производная по дуговой координате S

$$\frac{\delta \vec{r}}{\delta S} = \vec{t} \quad (29)$$

представляет собой касательный вектор к выбранной кривой единичной длины.

Обозначим \vec{e}_1 и \vec{e}_2 – единичные векторы по главным направлениям линейного оператора L и запишем

$$\frac{\delta \vec{r}}{\delta S} = \vec{e}_1 \cos \varphi + \vec{e}_2 \sin \varphi, \quad (30)$$

где φ – угол между вектором \vec{e}_1 и вектором \vec{r} .

С учетом разложения (4.30) равенство (4.28) запишем в таком виде:

$$\frac{\delta \vec{n}}{\delta S} = L(\vec{e}_1 \cos \varphi + \vec{e}_2 \sin \varphi) = \cos \varphi L\vec{e}_1 + \sin \varphi L\vec{e}_2. \quad (31)$$

Так как для главных значений линейного оператора справедливы равенства

$$L(\vec{e}_1) = \lambda_1 \vec{e}_1, \quad L(\vec{e}_2) = \lambda_2 \vec{e}_2, \quad (32)$$

то производную от вектора \vec{n} по дуговой координате S можем представить в виде

$$\frac{\delta \vec{n}}{\delta S} = \lambda_1 \cos \varphi \vec{e}_1 + \lambda_2 \sin \varphi \vec{e}_2. \quad (33)$$

Обозначив кривизну нормального сечения поверхности K и учитывая, что

$$K = -\frac{\delta \vec{r}}{\delta S} \cdot \frac{\delta \vec{n}}{\delta S}, \quad (34)$$

найдем

$$K = -\lambda_1 \cos^2 \varphi - \lambda_2 \sin^2 \varphi. \quad (35)$$

Собственные значения линейного оператора L равны

$$-\lambda_1 = K_1, \quad -\lambda_2 = K_2, \quad (36)$$

а собственные векторы определяют главные направления поверхности. С учетом (4.36) получим формулы Эйлера

$$K = K_1 \cos^2 \varphi - K_2 \sin^2 \varphi. \quad (37)$$

Выпишем следующие производные:

$$\begin{aligned} \frac{\delta \vec{r}}{\delta S} &= \cos \varphi \vec{e}_1 + \sin \varphi \vec{e}_2, \\ \frac{\delta \vec{n}}{\delta S} &= -k_1 \cos \varphi \vec{e}_1 - k_2 \sin \varphi \vec{e}_2. \end{aligned} \quad (38)$$

Умножив первую формулу (38) на k_1 и складывая почленно со второй, найдем

$$\begin{aligned} \frac{\delta \vec{n}}{\delta S} + k_1 \frac{\delta \vec{r}}{\delta S} &= (k_1 - k_2) \sin \varphi \vec{e}_2 \\ \text{или} & \end{aligned} \quad (39)$$

$$\delta \vec{n} + k_1 \delta \vec{r} = (k_1 - k_2) \sin \varphi \vec{e}_2 \delta S.$$

Вектор $\delta \vec{n} + k_1 \delta \vec{r}$ коллинеарен вектору \vec{e}_2 . Аналогично векторы $\delta \vec{n} + k_2 \delta \vec{r}$ и \vec{e}_1 также коллинеарны. Так как выполняется условие $\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2 = 0$, то скалярное произведение векторов $\delta \vec{n} + k_1 \delta \vec{r}$ и $\delta \vec{n} + k_2 \delta \vec{r}$ также будет равно нулю

$$(\delta \vec{n} + k_1 \delta \vec{r}) \cdot (\delta \vec{n} + k_2 \delta \vec{r}) = 0. \quad (40)$$

Равенство (40) преобразуем к виду

$$\delta \vec{n} \cdot \delta \vec{n} + (k_1 + k_2) \delta \vec{n} \cdot \delta \vec{r} + k_1 k_2 \delta \vec{r} \cdot \delta \vec{r} = 0. \quad (41)$$

Так как выполняются равенства

$$\delta \varphi^2 = \delta \vec{n} \cdot \delta \vec{n}, \quad \delta l = -\frac{1}{2} \delta \vec{n} \cdot \delta \vec{r}, \quad \delta S^2 = \delta \vec{r} \cdot \delta \vec{r},$$

то между тремя квадратичными формами существует связь

$$\delta \varphi^2 - 2(k_1 + k_2) \delta l + k_1 k_2 \delta S^2 = 0. \quad (42)$$

Аналогичная связь имеется между коэффициентами трех форм (14).

Рассмотрим слой, образованный двумя поверхностями. Вторая поверхность получена из первой поверхности смещением точек поверхности по нормали на некоторую величину $h = h(x^1, x^2)$. Поэтому обе поверхности имеют общую параметризацию

$$\vec{r} = \vec{r}(x^1, x^2); \quad \vec{R} = \vec{R}(x^1, x^2) = \vec{r}(x^1, x^2) + \vec{h}(x^1, x^2). \quad (43)$$

Произведем сферическое отображение поверхностей (рис. 3). Допустим, что для точек A и B поверхностей векторы оказались коллинеарными, причем скалярное произведение векторов $\vec{n} \cdot \vec{N} = 1$. Третья квадратичная форма поверхности для сферы является первой квадратичной формой. При сферическом отображении точка A поверхности переходит в точку A_0 на сфере (рис. 4). Касательная плоскость поверхности переходит в касательную плоскость сферы, поэтому

$$\vec{n}_1 \times \vec{n}_2 = \alpha \vec{r}_1 \times \vec{r}_2, \quad \vec{N}_1 \times \vec{N}_2 = \beta \vec{R}_1 \times \vec{R}_2. \quad (44)$$

Умножив векторно обе части равенств (44) на $\vec{r}_1 \times \vec{r}_2$ и $\vec{R}_1 \times \vec{R}_2$ соответственно, получим

$$\begin{vmatrix} \vec{r}_1 \cdot \vec{n}_1 & \vec{r}_1 \cdot \vec{n}_2 \\ \vec{r}_2 \cdot \vec{n}_1 & \vec{r}_2 \cdot \vec{n}_2 \end{vmatrix} = \alpha \begin{vmatrix} \vec{r}_1 \cdot \vec{r}_1 & \vec{r}_1 \cdot \vec{r}_2 \\ \vec{r}_2 \cdot \vec{r}_1 & \vec{r}_2 \cdot \vec{r}_2 \end{vmatrix}; \quad \begin{vmatrix} \vec{R}_1 \cdot \vec{N}_1 & \vec{R}_1 \cdot \vec{N}_2 \\ \vec{R}_2 \cdot \vec{N}_1 & \vec{R}_2 \cdot \vec{N}_2 \end{vmatrix} = \beta \begin{vmatrix} \vec{R}_1 \cdot \vec{R}_1 & \vec{R}_1 \cdot \vec{R}_2 \\ \vec{R}_2 \cdot \vec{R}_1 & \vec{R}_2 \cdot \vec{R}_2 \end{vmatrix}. \quad (45)$$

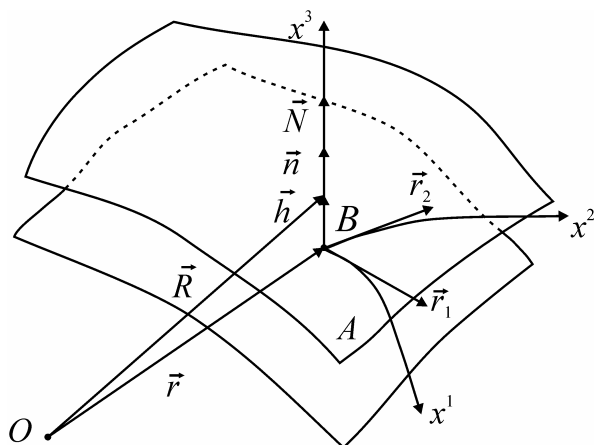


Рис. 3

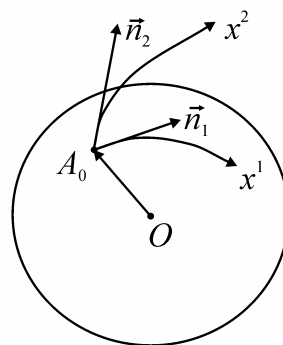


Рис. 4

Скалярные произведения, входящие в равенства (45), являются коэффициентами квадратичных форм

$$\begin{vmatrix} -b_{11} & -b_{12} \\ -b_{21} & -b_{22} \end{vmatrix} = \alpha \begin{vmatrix} g_{11} & g_{12} \\ g_{21} & g_{22} \end{vmatrix}; \quad \begin{vmatrix} -\hat{b}_{11} & -\hat{b}_{12} \\ -\hat{b}_{21} & -\hat{b}_{22} \end{vmatrix} = \beta \begin{vmatrix} \hat{g}_{11} & \hat{g}_{12} \\ \hat{g}_{21} & \hat{g}_{22} \end{vmatrix}. \quad (46)$$

Из равенств (46) определим коэффициенты α и β

$$\alpha = \frac{b_{11}b_{22} - b_{12}^2}{g_{11}g_{22} - g_{12}^2}; \quad \beta = \frac{\hat{b}_{11}\hat{b}_{22} - \hat{b}_{12}^2}{\hat{g}_{11}\hat{g}_{22} - \hat{g}_{12}^2}. \quad (47)$$

Обозначим $\alpha = K$, $\beta = \hat{K}$ и равенства (48) запишем в виде

$$\vec{n}_1 \times \vec{n}_2 = K \vec{r}_1 \times \vec{r}_2, \quad \vec{N}_1 \times \vec{N}_2 = \hat{K} \vec{R}_1 \times \vec{R}_2. \quad (48)$$

Если α и β отличны от нуля, то векторы \vec{n}_1 и \vec{n}_2 , а также \vec{N}_1 и \vec{N}_2 не коллинеарны.

Рассмотрим случай, когда $\vec{n} = \vec{N}$. В этом случае

$$K \vec{r}_1 \times \vec{r}_2 = \hat{K} \vec{R}_1 \times \vec{R}_2. \quad (49)$$

Умножим равенство (49) скалярно на вектор \vec{n}

$$K (\vec{r}_1 \times \vec{r}_2) \cdot \vec{n} = \hat{K} (\vec{R}_1 \times \vec{R}_2) \cdot \vec{N}. \quad (50)$$

Так как векторы $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{n}$, а также $\vec{R}_1, \vec{R}_2, \vec{N}$ образуют правые тройки, то объемы, построенные на этих векторах, равны по величине площадям, построенным на базисных векторах. Поэтому отношение гауссовых кривизн должно быть положительным

$$\frac{K}{\bar{K}} > 0. \quad (51)$$

Если же $\vec{n} = -\vec{N}$, то отношение гауссовых кривизн двух поверхностей будет отрицательным.

В первом случае условие (51) является необходимым для формирования тонкого слоя между двумя поверхностями. Таким образом доказано утверждение для формирования тонкого слоя (признак впервые сформулировал Геннадий Алексеевич Завьялов).

3. Необходимый признак формирования тонкого слоя между двумя поверхностями

Если точка A и нормальным вектором \vec{n} принадлежит эллиптической поверхности, то такой же должна быть вторая поверхность с принадлежащей точкой B и нормалью $\vec{N} = \vec{n}$. Если же первая поверхность с точкой A и нормальным вектором \vec{n} эллиптическая, а другая поверхность с точкой B и нормалью $\vec{N} = -\vec{n}$ гиперболическая, то отношение гауссовых кривизн поверхностей будет отрицательным и условие формирования слоя не будет выполняться.

Литература

1. Векуа, И.Н. Некоторые общие методы построения различных вариантов теории оболочек / И.Н. Векуа. – М.: Наука, 1982. – 286 с.
2. Завьялов, Г.А. Геометрия тонкого слоя / Г.А. Завьялов, О.Г. Завьялов, Ю.В. Павлова. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2003. – 130 с.

Поступила в редакцию 26 марта 2007 г.

ОБ ОДНОМ МЕТОДЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА

В.В. Карачик, Н.А. Антропова

Основываясь на полученном ранее представлении аналитических функций по обобщенной формуле Альманси, найдены решения уравнения Пуассона и неоднородного бигармонического уравнения в случае полиномиальной правой части.

Введение

Рассмотрим уравнение Пуассона

$$\Delta u = f(x), \quad x \in D, \quad (1)$$

где правая часть $f(x)$ является аналитической в D функцией, а $D \subset R^n$ звездная область с центром в начале координат. Хорошо известно, что некоторое решение уравнения (1) может быть записано в виде потенциала объемных масс [1]

$$u(x) = -\frac{1}{\omega_n} \int_D E(x, \xi) f(\xi) d\xi, \quad (2)$$

где $E(x, \xi) = \frac{1}{n-2} |\xi - x|^{2-n}$ (при $n > 2$) элементарное решение уравнения Лапласа, а ω_n площадь единичной сферы в R^n . Однако, это красивое и полезное решение мало пригодно для вычислений. Например, при полиномиальной правой части $f(x)$ решение $u(x)$ может быть полиномом. Чтобы подсчитать это решение нужно вычислить n -кратный интеграл по D , что довольно трудно сделать. В данной работе приводятся формулы, которые упрощают нахождение решения уравнения Пуассона (1) и неоднородного бигармонического уравнения (17) в случае полиномиальной правой части $f(x)$. Следует отметить, что полученные формулы справедливы и для некоторых аналитических функций, для которых соответствующие операторные ряды сходятся.

Уравнение Пуассона

Теорема 1. Некоторое решение уравнения (1) может быть найдено в виде

$$u(x) = \frac{|x|^2}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k |x|^{2k}}{(2k)!(2k+2)!!} \int_0^1 (1-\alpha)^k \alpha^{k+n/2-1} \Delta^k f(\alpha x) d\alpha, \quad (3)$$

Доказательство. Определим функции $G_k(x; u)$ по формуле [2]

$$G_k(x; u) = \begin{cases} u(x), & k = 0 \\ \frac{1}{4^k} \frac{|x|^{2k}}{k!} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{k-1}}{(k-1)!} \alpha^{n/2-1} u(\alpha x) d\alpha, & k > 0 \end{cases}$$

где $u(x)$ некоторая гармоническая в D функция. Поскольку D звездная область, то справедливо следующее разложение полинома $f(x)$ [3]

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} G_i(x; v_i) = v_0(x) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{4^k} \frac{|x|^{2k}}{k!} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{k-1}}{(k-1)!} \alpha^{n/2-1} v_k(\alpha x) d\alpha, \quad x \in D, \quad (4)$$

где гармонические функции $v_k(x)$ задаются равенством

$$v_k(x) = \Delta^k f(x) + \sum_{s=1}^{\infty} \frac{(-1)^s |x|^{2s}}{4^s s!} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{s-1} \alpha^{s-1}}{(s-1)!} \alpha^{n/2-1} \Delta^{k+s} f(\alpha x) d\alpha. \quad (5)$$

В силу свойства нормируемости системы функций $\{G_k(x; u) | k = 0, 1, \dots\}$ [2] решение уравнения (4) можно записать в виде

$$u(x) = G_1(x; v_0) + G_2(x; v_1) + \dots = \sum_{k=1}^{\infty} G_k(x; v_{k-1}) \quad (6)$$

ибо по определению функций $G_k(x; v)$ верны равенства $\Delta G_k(x; u) = G_{k-1}(x; u)$, а также $\Delta G_0(x; u) = 0$ и значит

$$\Delta u(x) = \Delta G_1(x; v_0) + \Delta G_2(x; v_1) + \dots = G_0(x; v_0) + \Delta G_1(x; v_1) + \dots = f(x).$$

Перепишем решение (6) в виде

$$u(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{4^k} \frac{|x|^{2k}}{k!} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{k-1}}{(k-1)!} \alpha^{n/2-1} v_{k-1}(\alpha x) d\alpha.$$

Подставим в эту формулу значения $v_k(x)$ из (5). Тогда будем иметь

$$u(x) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{4^k} \frac{|x|^{2k}}{k!} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{k-1}}{(k-1)!} \alpha^{n/2-1} \Delta^{k-1} f(\alpha x) d\alpha + \sum_{k,s=1}^{\infty} \frac{(-1)^s}{4^{k+s}} \frac{|x|^{2(k+s)}}{k!s!} \times \\ \times \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{k-1} \alpha^{2s+n/2-1}}{(k-1)!} \int_0^1 \frac{(1-\beta)^{s-1} \beta^{s-1}}{(s-1)!} \beta^{n/2-1} \Delta^{k+s-1} f(\alpha\beta x) d\beta d\alpha. \quad (7)$$

Обозначим последнюю сумму в полученном выражении через $I(x)$. Тогда получим

$$I(x) = \sum_{k,s=1}^{\infty} \frac{(-1)^s}{4^{k+s}} \frac{|x|^{2k+2s}}{k!s!} \times \\ \times \int_0^1 \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{k-1} \alpha^{2s+n/2-1}}{(k-1)!} \frac{(1-\beta)^{s-1} \beta^{s+n/2-2}}{(s-1)!} \Delta^{k+s-1} f(\alpha\beta x) d\beta d\alpha. \quad (8)$$

После замены во внутреннем интеграле $\alpha\beta \rightarrow \beta$ будем иметь

$$I(x) = \\ = \sum_{k,s=1}^{\infty} \frac{(-1)^s}{4^{k+s}} \frac{|x|^{2k+2s}}{k!s!} \int_0^1 \int_0^\alpha \frac{\alpha(1-\alpha)^{k-1} (\alpha-\beta)^{s-1}}{(k-1)!(s-1)!} \beta^{n/2+s-2} \Delta^{k+s-1} f(\beta x) d\beta d\alpha.$$

Меняя порядок интегрирования в повторном интеграле и вводя обозначение

$$R(\beta) = \int_\beta^1 \alpha(1-\alpha)^{k-1} (\alpha-\beta)^{s-1} d\alpha \quad (9)$$

получим

$$I(x) = \sum_{k,s=1}^{\infty} \frac{(-1)^s}{4^{k+s}} \frac{|x|^{2k+2s}}{k!s!(k-1)!(s-1)!} \int_0^1 R(\beta) \beta^{n/2+s-2} \Delta^{k+s-1} f(\beta x) d\beta.$$

Вычислим функцию $R(\beta)$. Заменяя под интегралом $\alpha \rightarrow \alpha + \beta$ будем иметь

$$R(\beta) = \int_0^{1-\beta} (\alpha + \beta)(1-\alpha-\beta)^{k-1} \alpha^{s-1} d\alpha.$$

Заменяя опять $\alpha \rightarrow \alpha(1-\beta)$, найдем

$$R(\beta) = (1-\beta)^{k+s-1} \int_0^1 (\alpha - \alpha\beta + \beta)(1-\alpha)^{k-1} \alpha^{s-1} d\alpha.$$

Используя теперь представление бета-функции Эйлера в виде

$$B(s, k) = \int_0^1 \alpha^{s-1} (1-\alpha)^{k-1} d\alpha, \quad (10)$$

после простого преобразования получим

$$R(\beta) = B(s+1, k)(1-\beta)^{s+k} + B(s, k)\beta(1-\beta)^{s+k-1}.$$

Воспользовавшись теперь связью между бета-функцией и гамма-функцией, а затем известной формулой $\Gamma(s) = (s-1)!$ выпишем

$$R(\beta) = \frac{s!(k-1)!}{(s+k)!} (1-\beta)^{s+k} + \frac{(s-1)!(k-1)!}{(s+k-1)!} \beta(1-\beta)^{s+k-1}.$$

Отсюда сразу получаем выражение для $I(x)$

$$I(x) = \sum_{k,s=1}^{\infty} \frac{(-1)^s |x|^{2k+2s}}{k! 4^{k+s}} \int_0^1 \left(\frac{1}{(s+k)!(s-1)!} \beta^{s-1} (1-\beta)^{s+k} + \frac{1}{(s+k-1)!s!} \beta^s (1-\beta)^{s+k-1} \right) \beta^{n/2-1} \Delta^{k+s-1} f(\beta x) d\beta.$$

Кратное суммирование $\sum_{i,s=1}^{\infty}$ здесь может быть взято следующим образом $\sum_{i,s=1}^{\infty} = \sum_{l=2}^{\infty} \sum_{i+s=l} = \sum_{l=2}^{\infty} \sum_{s=1}^{l-1}$. Тогда будем иметь

$$I(x) = - \sum_{l=2}^{\infty} \frac{|x|^{2l}}{4^l} \int_0^1 \sum_{s=1}^{l-1} \left(\frac{(-1)^s \beta^{s-1}}{l(s-1)!(l-s)!} (1-\beta)^l + \frac{(-1)^s \beta^s}{(l-1)!s!(l-s)!} (1-\beta)^{l-1} \right) \beta^{n/2-1} \Delta^{l-1} f(\beta x) d\beta.$$

Если обозначить в полученном выражении

$$J_1(\beta) = \frac{(1-\beta)^l}{l!} \sum_{s=1}^{l-1} \frac{(-1)^s \beta^{s-1}}{(l-s)!(s-1)!}$$

и

$$J_2(\beta) = \frac{(1-\beta)^{l-1}}{(l-1)!} \sum_{s=1}^{l-1} \frac{(-1)^s \beta^s}{(l-s)!s!},$$

тогда получим

$$I(x) = \sum_{l=2}^{\infty} \frac{|x|^{2l}}{4^l} \int_0^1 (J_1(\beta) + J_2(\beta)) \beta^{n/2-1} \Delta^{l-1} f(\beta x) d\beta. \tag{11}$$

Вычислим суммы $J_1(\beta)$ и $J_2(\beta)$. Имеем

$$\begin{aligned} J_1(\beta) &= - \frac{(1-\beta)^l}{l!} \sum_{s=1}^{l-1} \frac{(-\beta)^{s-1}}{(l-1-(s-1))!(s-1)!} = - \frac{(1-\beta)^l}{l!} \sum_{s=0}^{l-2} \frac{(-\beta)^s}{(l-1-s)!s!} = \\ &= - \frac{(1-\beta)^l}{l!} \left[\sum_{s=0}^{l-1} \frac{(-\beta)^s}{(l-1-s)!s!} - \frac{(-\beta)^{l-1}}{(l-1)!} \right] = \frac{(1-\beta)^l}{l!(l-1)!} \left[(-\beta)^{l-1} - (1-\beta)^{l-1} \right] \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} J_2(\beta) &= \frac{(1-\beta)^{l-1}}{(l-1)!} \sum_{s=1}^{l-1} \frac{(-\beta)^s}{(l-s)!s!} = \frac{(1-\beta)^{l-1}}{(l-1)!} \left[\sum_{s=0}^l \frac{(-\beta)^s}{(l-s)!s!} - \frac{(-\beta)^l}{l!} - \frac{1}{l!} \right] = \\ &= \frac{(1-\beta)^{l-1}}{(l-1)!} \left[\frac{(1-\beta)^l}{l!} - \frac{(-\beta)^l}{l!} - \frac{1}{l!} \right] = \frac{(1-\beta)^{l-1}}{l!(l-1)!} \left[(1-\beta)^l - (-\beta)^l - 1 \right]. \end{aligned}$$

Отсюда

$$\begin{aligned} J_1(\beta) + J_2(\beta) &= \frac{(1-\beta)^{l-1}}{l!(l-1)!} \left[(1-\beta)(-\beta)^{l-1} - (1-\beta)^l + (1-\beta)^l - (-\beta)^l - 1 \right] = \\ &= \frac{(1-\beta)^{l-1}}{l!(l-1)!} \left[(-\beta)^{l-1} - 1 \right]. \end{aligned}$$

После подстановки полученного выражения в (11), а затем замены индекса l на индекс k получим

$$\begin{aligned} I(x) &= - \sum_{l=2}^{\infty} \frac{(-1)^l |x|^{2l}}{4^l l!} \int_0^1 \frac{\beta^{l-1} (1-\beta)^{l-1}}{(l-1)!} \beta^{n/2-1} \Delta^{l-1} f(\beta x) d\beta - \\ &= - \sum_{l=2}^{\infty} \frac{1}{4^l l!} \int_0^1 \frac{(1-\beta)^{l-1}}{(l-1)!} \beta^{n/2-1} \Delta^{l-1} f(\beta x) d\beta = \end{aligned}$$

$$= -\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k |x|^{2k}}{4^k k!} \int_0^1 \frac{\alpha^{k-1} (1-\alpha)^{k-1}}{(k-1)!} \alpha^{n/2-1} \Delta^{k-1} f(\alpha x) d\alpha -$$

$$-\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1 |x|^{2k}}{4^k k!} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{k-1}}{(k-1)!} \alpha^{n/2-1} \Delta^{k-1} f(\alpha x) d\alpha. \quad (12)$$

Подставляя найденное значение $I(x)$ в (7) и замечая, что последняя сумма из (12) сокращается с первой суммой из (7) получим

$$u(x) = -\sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k |x|^{2k}}{4^k k!} \int_0^1 \frac{\alpha^{k-1} (1-\alpha)^{k-1}}{(k-1)!} \alpha^{n/2-1} \Delta^{k-1} f(\alpha x) d\alpha$$

или заменяя индекс k на $k+1$ найдем

$$u(x) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k |x|^{2k+2}}{4^{k+1} k!(k+1)!} \int_0^1 (1-\alpha)^k \alpha^{k+n/2-1} \Delta^k f(\alpha x) d\alpha, \quad (13)$$

что совпадает с формулой (3).

Замечание 1. Решение (3) имеет смысл и в случае аналитической в D функции $f(x)$, если соответствующий ряд сходится в D . В [3] была установлена сходимость ряда представляющего решение $u(x)$ только лишь в некоторой окрестности начала координат.

Замечание 2. Конечно же, компактная запись (2) решения уравнения Пуассона, более привлекательна, чем громоздкий операторный ряд из (3), но как показывает следующий пример, в случае когда $f(x)$ полином решение $u(x)$ находится легко.

Пример 1. Пусть правая часть в уравнении (4) имеет вид $f(x) = x_i$, тогда ряд из (13) содержит только одно слагаемое при $k=0$

$$u(x) = \frac{x_i |x|^2}{4} \int_0^1 \alpha^{n/2} d\alpha = \frac{1}{2(n+2)} x_i |x|^2. \quad (14)$$

Проверим полученное решение

$$\Delta u(x) = \frac{1}{2(n+2)} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} \right) (x_i x_1^2 + \dots + x_i^3 + \dots + x_i x_n^2) =$$

$$= \frac{1}{2(n+2)} (2x_i + \dots + 6x_i + \dots + 2x_i) = \frac{2n+4}{2(n+2)} x_i = x_i.$$

Пусть теперь, в общем случае, $f(x) = P_m(x)$, где $P_m(x)$ однородный полином степени m . Тогда верно следующее утверждение

Теорема 2. Решение уравнения (1) вида (3) при $f(x) = P_m(x)$ может быть записано в форме

$$u(x) = |x|^2 \sum_{k=0}^{[m/2]+1} (-1)^k \frac{|x|^{2k} \Delta^k P_m(x)}{(2,2)_{k+1} (n+2m-2k,2)_{k+1}}, \quad (15)$$

где $(a,b)_k = a(a+b)\dots(a+kb-b)$ обобщенный символ Похгаммера, а $[a]$ – целая часть числа a .

Доказательство. Преобразуем формулу (3). Очевидно, что в силу однородности полинома $P_m(x)$ верно равенство $\Delta^k P_m(\alpha x) = \alpha^{m-2k} \Delta^k P_m(x)$. Поэтому (3) имеет вид

$$u(x) = \frac{|x|^2}{2} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{|x|^{2k} \Delta^k P_m(x)}{(2k)!!(2k+2)!!} \int_0^1 (1-\alpha)^k \alpha^{k+n/2-1} \alpha^{m-2k} d\alpha.$$

Принимая во внимание определение бета-функции (10) запишем

$$u(x) = \frac{|x|^2}{2} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{|x|^{2k} \Delta^k P_m(x)}{(2k)!!(2k+2)!!} B(k+1, m-k+n/2).$$

Воспользовавшись теперь соотношением $B(s,k) = \Gamma(s)\Gamma(k)/\Gamma(s+k)$, а также равенством

$$(2k)!!(2k+2)!! = 2 \cdot 4^k k!(k+1)! = 2 \cdot 4^k (k+1)! \Gamma(k+1)$$

найдем

$$u(x) = |x|^2 \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\Gamma(k+1)\Gamma(m-k+n/2)}{4^{k+1}(k+1)!\Gamma(m+n/2+1)\Gamma(k+1)} |x|^{2k} \Delta^k P_m(x).$$

После сокращения получим

$$u(x) = |x|^2 \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\Gamma(m-k+n/2)}{4^{k+1}(k+1)!\Gamma(m+n/2+1)} |x|^{2k} \Delta^k P_m(x). \quad (16)$$

Теперь, используя свойство гамма-функции $\Gamma(s+1) = s\Gamma(s)$ можно найти

$$\Gamma(m+n/2+1) = (m+n/2)(m+n/2-1)(m-k+n/2)\Gamma(m-k+n/2),$$

а значит, сокращая дробь в (16) на $\Gamma(m-k+n/2)$ получим

$$u(x) = |x|^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k |x|^{2k} \Delta^k P_m(x)}{(2k+2)!(n+2m)(n+2m-2k)}.$$

Наконец, вспоминая определение обобщенного символа Похгаммера запишем $(2k+2)!! = 2 \cdot 4(2k+2) = (2,2)_{k+1}$ и $(n+2m-2k)(n+2m) = (n+2m-2k,2)_{k+1}$, а значит

$$u(x) = |x|^2 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k |x|^{2k} \Delta^k P_m(x)}{(2,2)_{k+1}(n+2m-2k,2)_{k+1}}.$$

Что и требовалось доказать.

Если теперь опять вернуться к примеру 1, то $m=1$ и при $k=0$ будем иметь $(2,2)_{k+1}(n+2m-2k,2)_{k+1}|_{k=0} = (2,2)_1(n+2,2)_1 = 2(n+2)$ и значит

$$u(x) = \frac{x_i |x|^2}{2(n+2)}.$$

Бигармоническое уравнение

Рассмотрим теперь неоднородное бигармоническое уравнение

$$\Delta^2 u = f(x), \quad x \in D. \quad (17)$$

Теорема 3. Решение уравнения (17) может быть записано в форме

$$u(x) = \frac{|x|^4}{4} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k |x|^{2k}}{(2k)!!(2k+4)!!} \int_0^1 (1-\alpha)^{k+1} \alpha^{k+n/2-1} \Delta^k f(\alpha x) d\alpha. \quad (18)$$

Доказательство. Обозначая $\Delta u = g$ получим для $g(x)$ уравнение Пуассона (1) $\Delta g = f$ и значит согласно теореме 1

$$g(x) = \frac{|x|^2}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{|x|^{2k}}{(2k)!!(2k+2)!!} \int_0^1 (\alpha-1)^k \alpha^{k+n/2-1} \Delta^k f(\alpha x) d\alpha, \quad (19)$$

и, кроме того,

$$u(x) = \frac{|x|^2}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{|x|^{2k}}{(2k)!!(2k+2)!!} \int_0^1 (\alpha-1)^k \alpha^{k+n/2-1} \Delta^k g(\alpha x) d\alpha. \quad (20)$$

Замечая, что $\Delta^k g(x) = \Delta^{k-1} f(x)$ из (20) найдем

$$\begin{aligned} u(x) &= \frac{|x|^2}{4} \int_0^1 \alpha^{n/2-1} g(\alpha x) d\alpha + \\ &+ \frac{|x|^2}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|x|^{2k}}{(2k)!!(2k+2)!!} \int_0^1 (\alpha-1)^k \alpha^{k+n/2-1} \Delta^{k-1} f(\alpha x) d\alpha. \end{aligned} \quad (21)$$

Преобразуем первый интеграл в полученном равенстве. Используя (19) найдем

$$\begin{aligned} &\frac{|x|^2}{4} \int_0^1 \alpha^{n/2-1} g(\alpha x) d\alpha = \\ &= \frac{|x|^4}{8} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k |x|^{2k}}{(2k)!!(2k+2)!!} \int_0^1 \int_0^1 \alpha^{2k+2+n/2-1} (1-\beta)^k \beta^{k+n/2-1} \Delta^k f(\alpha\beta x) d\beta d\alpha = \end{aligned}$$

$$= \frac{|x|^4}{8} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k |x|^{2k}}{(2k)!(2k+2)!!} \int_0^1 \int_0^1 \alpha(\alpha - \beta)^k (\alpha\beta)^{k+n/2-1} \Delta^k f(\alpha\beta x) d(\alpha\beta) d\alpha.$$

Заменяя $\alpha\beta \rightarrow \beta$, а затем, меняя порядок интегрирования, получим

$$\begin{aligned} & \frac{|x|^2}{4} \int_0^1 \alpha^{n/2-1} g(\alpha x) d\alpha = \\ & = \frac{|x|^4}{8} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k |x|^{2k}}{(2k)!(2k+2)!!} \int_0^1 \int_0^\alpha \alpha(\alpha - \beta)^k \beta^{k+n/2-1} \Delta^k f(\beta x) d\beta d\alpha = \\ & = \frac{|x|^4}{8} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k |x|^{2k}}{(2k)!(2k+2)!!} \int_0^1 \int_\beta^1 \alpha(\alpha - \beta)^k d\alpha \beta^{k+n/2-1} \Delta^k f(\beta x) d\beta. \end{aligned} \quad (22)$$

Вычислим внутренний интеграл. Интеграл такого типа был уже вычислен в (9) и поэтому

$$\int_\beta^1 \alpha(\alpha - \beta)^k d\alpha = \frac{(1-\beta)^{k+2}}{k+2} + \frac{\beta(1-\beta)^{k+1}}{k+1}.$$

Подставляя найденное значение интеграла в (22) и, меняя $\beta \rightarrow \alpha$, получим

$$\begin{aligned} & \frac{|x|^2}{4} \int_0^1 \alpha^{n/2-1} g(\alpha x) d\alpha = \\ & = \frac{|x|^4}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k |x|^{2k}}{(2k)!(2k+2)!!} \int_0^1 \left(\frac{(1-\alpha)^{k+2}}{2(2k+4)} + \frac{\alpha(1-\alpha)^{k+1}}{2(2k+2)} \right) \alpha^{k+n/2-1} \Delta^k f(\alpha x) d\alpha. \end{aligned}$$

Вернемся к формуле (21) и преобразуем второй интеграл. Заменяем в нем $k \rightarrow k+1$

$$\begin{aligned} & \frac{|x|^2}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{|x|^{2k}}{(2k)!(2k+2)!!} \int_0^1 (\alpha-1)^k \alpha^{k+n/2-1} \Delta^{k-1} f(\alpha x) d\alpha = \\ & = -\frac{|x|^4}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k |x|^{2k}}{(2k)!(2k+2)!!} \int_0^1 \frac{\alpha(1-\alpha)^{k+1}}{(2k+2)(2k+4)} \alpha^{k+n/2-1} \Delta^k f(\alpha x) d\alpha. \end{aligned}$$

Складывая полученные интегралы найдем

$$u(x) = \frac{|x|^4}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k |x|^{2k}}{(2k)!(2k+2)!!} \int_0^1 K(\alpha) \alpha^{k+n/2-1} \Delta^k f(\alpha x) d\alpha, \quad (23)$$

где

$$K(\alpha) = \frac{(1-\alpha)^{k+2}}{2(2k+4)} + \frac{\alpha(1-\alpha)^{k+1}}{2(2k+2)} - \frac{\alpha(1-\alpha)^{k+1}}{(2k+2)(2k+4)}.$$

Вычислим функцию $K(\alpha)$. Имеем

$$\begin{aligned} K(\alpha) &= \frac{(1-\alpha)^{k+1}}{2} \left(\frac{1-\alpha}{2k+4} + \frac{\alpha}{2k+2} - \frac{2\alpha}{(2k+2)(2k+4)} \right) = \\ &= \frac{(1-\alpha)^{k+1}}{2} \frac{(1-\alpha)(2k+2) + \alpha(2k+4) - 2\alpha}{(2k+2)(2k+4)} = \\ &= \frac{(1-\alpha)^{k+1}}{2} \frac{(2k+2)}{(2k+2)(2k+4)} = \frac{(1-\alpha)^{k+1}}{2(2k+4)}. \end{aligned}$$

Значит, из (23) получим

$$u(x) = \frac{|x|^4}{4} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k |x|^{2k}}{(2k)!(2k+4)!!} \int_0^1 (1-\alpha)^{k+1} \alpha^{k+n/2-1} \Delta^k f(\alpha x) d\alpha.$$

Что и требовалось доказать.

Пример 2. Пусть правая часть в уравнении (17) имеет вид $f(x) = x_i$, тогда ряд из (18) содержит только одно слагаемое при $k = 0$

$$u(x) = \frac{x_i |x|^4}{32} \int_0^1 (1-\alpha)\alpha^{n/2} d\alpha = \frac{B(2, n/2+1)}{32} x_i |x|^4 =$$

$$= \frac{\Gamma(2)\Gamma(n/2+1)}{32\Gamma(n/2+3)} x_i |x|^4 = \frac{\Gamma(n/2+1)}{32(n/2+1)(n/2+2)\Gamma(n/2+1)} x_i |x|^4 = \frac{x_i |x|^4}{8(n+2)(n+4)}.$$

Здесь мы воспользовались известными свойствами гамма и бета функций, ранее уже применявшимися в теореме 1. Проверим полученное решение. Для этого воспользуемся равенством [2]

$$\Delta(|x|^s R_r(x)) = s(s+2r+n-2)|x|^{s-2} R_r(x) + |x|^s \Delta R_r(x),$$

где $R_r(x)$ однородный многочлен при $s=4$, $r=1$ и $R_r(x) = x_i$. Тогда будем иметь

$$v(x) = \Delta u(x) = \frac{1}{8(n+2)(n+4)} \left(4(4+2+n-2)|x|^2 x_i + |x|^4 \Delta x_i \right) =$$

$$= \frac{4(n+4)|x|^2 x_i}{8(n+2)(n+4)} = \frac{|x|^2 x_i}{2(n+2)}.$$

Полученная функция $v(x)$ совпадает с решением уравнения $\Delta v = x_i$ из примера 1 и поэтому $\Delta^2 u = x_i$.

Докажем теорему, аналогичную теореме 2.

Теорема 4. Решение уравнения (17) вида (18) при $f(x) = P_m(x)$ может быть записано в форме

$$u(x) = |x|^4 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (k+1) |x|^{2k} \Delta^k P_m(x)}{(2,2)_{k+2} (n+2m-2k,2)_{k+2}}. \quad (24)$$

Доказательство. Преобразуем формулу (18) из теоремы 3. Опять воспользуемся однородностью полинома $P_m(x)$ из которой следует равенство $\Delta^k P_m(\alpha x) = \alpha^{m-2k} \Delta^k P_m(x)$. Поэтому, формула (18) имеет вид

$$u(x) = \frac{|x|^4}{4} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{|x|^{2k} \Delta^k P_m(x)}{(2k)!!(2k+4)!!} \int_0^1 (1-\alpha)^{k+1} \alpha^{k+n/2-1} \alpha^{m-2k} d\alpha.$$

Учитывая свойство (10) бета-функции запишем

$$u(x) = \frac{|x|^4}{4} \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{|x|^{2k} \Delta^k P_m(x)}{(2k)!!(2k+4)!!} B(k+2, m-k+n/2).$$

Воспользовавшись теперь соотношением $B(s,k) = \Gamma(s)\Gamma(k)/\Gamma(s+k)$, а также равенством

$$(2k)!!(2k+4)!! = 4^{k+1} k!(k+2)! = 4^{k+1} (k+2)! \Gamma(k+1)$$

получим

$$u(x) = |x|^4 \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\Gamma(k+2)\Gamma(m-k+n/2)}{4^{k+2} (k+2)! \Gamma(m+n/2+2) \Gamma(k+1)} |x|^{2k} \Delta^k P_m(x).$$

После сокращения найдем

$$u(x) = |x|^4 \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{(k+1)\Gamma(m-k+n/2)}{4^{k+2} (k+2)! \Gamma(m+n/2+2)} |x|^{2k} \Delta^k P_m(x). \quad (25)$$

Теперь, используя свойство гамма-функции $\Gamma(s+1) = s\Gamma(s)$, можно найти

$$\Gamma(m+n/2+2) = (m+n/2+1)(m+n/2)(m-k+n/2)\Gamma(m-k+n/2),$$

а значит, сокращая дробь в (24) на $\Gamma(m-k+n/2)$, получим

$$u(x) = |x|^4 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (k+1) |x|^{2k} \Delta^k P_m(x)}{(2k+4)!!(n+2m+2)(n+2m-2k)}.$$

Наконец, вспоминая опять определение обобщенного символа Похгаммера запишем $(2k+4)!! = 2 \cdot 4(2k+4) = (2,2)_{k+2}$ и $(n+2m-2k)(n+2m+2) = (n+2m-2k,2)_{k+2}$,

а значит

$$u(x) = |x|^4 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (k+1) |x|^{2k} \Delta^k P_m(x)}{(2,2)_{k+2} (n+2m-2k,2)_{k+2}}.$$

Что и требовалось доказать.

Если опять рассмотреть пример 2, то $m=1$ и при $k=0$ будем иметь

$$(2,2)_{k+2} (n+2m-2k,2)_{k+2|k=0} = (2,2)_2 (n+2,2)_2 = 8(n+2)(n+4)$$

и значит

$$u(x) = \frac{x_i |x|^4}{8(n+2)(n+4)},$$

что совпадает с решением, полученным в примере 2.

Литература

1. Бицадзе, А.В. Уравнения математической физики / А.В. Бицадзе. – М.: Наука, 1976. – 336 с.
2. Karachik, V.V. Normalized system of functions with respect to the Laplace operator and its applications / V.V. Karachik // Journal of Mathematical Analysis and Applications. – 2003. – Vol. 287, № 2. – P. 577–592.
3. Карачик, В.В. Об одном представлении аналитических функций / В.В. Карачик // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2007. – Вып. 8. – № 3(75). – С. 15–23.

Поступила в редакцию 21 июня 2007 г.

ТОЧНАЯ ПО ПОРЯДКУ ОЦЕНКА ПРИБЛИЖЕННОГО РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ НА КОЛЬЦЕ

А.С. Кутузов

С использованием метода проекционной регуляризации построено приближенное решение одной многомерной обратной задачи для уравнения теплопроводности и получена точная по порядку оценка этого решения.

1. Постановка обратной задачи. Рассмотрим дифференциальное уравнение

$$\frac{\partial u(x, y, t)}{\partial t} = \Delta u(x, y, t), \quad (1)$$

в котором $x, y \in K$, K – кольцо, ограниченное окружностями Γ_1 и Γ_2 с радиусами r_1 и r_2 соответственно, $t \geq 0$, $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$ – оператор Лапласа. Пусть известны следующие начальные и граничные условия:

$$u(x, y, 0) = 0, \quad x, y \in K, \quad (2)$$

$$u|_{\Gamma_1} = 0, \quad t \geq 0, \quad (3)$$

$$u|_{\Gamma_0} = f(t); \quad \Gamma_0 = \{x, y \in K : x^2 + y^2 = r_0^2, r_1 < r_0 < r_2\}, t \geq 0, \quad (4)$$

а граничное значение $u|_{\Gamma_2}$ функции $u(x, y, t)$ подлежит определению.

Будем искать решение этой задачи, являющееся осесимметричным, то есть таким, что

$$u(x, y, t) = u\left(\sqrt{x^2 + y^2}, t\right). \quad (5)$$

Выполним замену переменной $z = \sqrt{x^2 + y^2}$. Тогда задача (1)–(4) сводится к следующей:

$$\frac{\partial u(z, t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(z, t)}{\partial z^2} + \frac{1}{z} \frac{\partial u(z, t)}{\partial z} \quad t \geq 0, \quad r_1 \leq z \leq r_2, \quad (6)$$

$$u|_{z=0} = 0, \quad r_1 \leq z \leq r_2, \quad (7)$$

$$u|_{z=r_1} = 0, \quad t \geq 0, \quad (8)$$

$$u|_{z=r_0} = f(t), \quad t \geq 0, \quad r_1 < r_0 < r_2, \quad (9)$$

а определить требуется $u|_{z=r_2} = u_0(r_2, t), \quad t \geq 0$.

Задача (6)–(9) является некорректно поставленной.

Предположим, что при $f(t) = f_0(t) \in L_2[0, \infty)$ существует точное решение $u_0(r_2, t) \neq 0$ поставленной задачи, которое принадлежит пространству $W_2^1[0, \infty)$, причем для этого решения $u_0(r_2, 0) = 0$ и существует число $T > 2$ такое, что при $t \geq T$

$$u_0(r_2, t) = 0. \quad (10)$$

Кроме того, $u_0(r_2, t) \in M_r$, где

$$M_r = \left\{ u_0 \in W_2^1[0, \infty) : \|u_0\|_{W_2^1}^2 \leq r^2 \right\}. \quad (11)$$

Однако точное значение $f_0(t)$ нам неизвестно, а вместо него даны некоторое приближение $f_\delta(t) \in L_2[0, \infty)$ и уровень погрешности $\delta > 0$ такие, что

$$\|f_0 - f_\delta\|_{L_2} \leq \delta. \quad (12)$$

Требуется, используя исходные данные f_δ, δ , и M_r задачи (6)–(9) построить приближенное решение $u_\delta(t)$ и оценить его уклонение $\|u_0 - u_\delta\|_{L_2}$ от точного решения $u_0(t) = u_0(r_2, t)$.

Используя метод разделения переменных, можно показать, что к задаче (6)–(9) можно применять преобразование Фурье на полупрямой по t в предположении, что

$$u(z, t) = 0 \text{ при } t < 0. \quad (13)$$

2. Сведение уравнения (6) к обыкновенному дифференциальному уравнению. Учитывая (13), в качестве рабочего пространства \overline{H} возьмем комплексный вариант $L_2[0, \infty)$ над полем действительных чисел, то есть его элементы имеют вид $u(t) + iv(t)$, где $u, v \in L_2[0, \infty)$ и норма в нем определяется по формуле $\|u + iv\|_{\overline{H}}^2 = \|u\|_{L_2}^2 + \|v\|_{L_2}^2$. Тогда пространство \overline{H} будет гильбертовым, а преобразование Фурье на нем определим формулой

$$F[u(t)] = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty u(t) e^{-it\tau} dt, \quad \tau \geq 0. \quad (14)$$

Из теоремы Планшереля, сформулированной в [2], следует изометричность преобразования F , определенного формулой (14).

Применяя к уравнению (6), с учетом условия (13), преобразование Фурье F , получаем

$$\frac{d^2 \hat{u}(z, \tau)}{dz^2} + \frac{1}{z} \frac{d\hat{u}(z, \tau)}{dz} = i\tau \hat{u}(z, \tau); \quad \tau \geq 0, \quad r_1 \leq z \leq r_2, \quad (15)$$

где $\hat{u}(z, \tau) = F[u(z, t)]$.

Для уравнения (15) поставим задачу, добавив условия

$$\hat{u}(r_1, \tau) = 0, \quad \tau \geq 0, \quad (16)$$

$$\hat{u}(r_0, \tau) = \hat{f}(\tau), \quad \tau \geq 0, \quad (17)$$

где $\hat{f}(\tau) = F[f(t)]$.

Из (15)–(17) требуется определить $\hat{u}(r_2, \tau) = \hat{u}_0(\tau), \tau \geq 0$.

Выполним замену

$$\hat{u}(z, \tau) = \hat{v}(z, \tau) \cdot z^{-\frac{1}{2}}, \quad (18)$$

предложенную в [5, с.131], чтобы привести уравнение (15) к нормальному виду.

После преобразований задача (15)–(17) сводится к следующей:

$$\frac{d^2 \hat{v}(z, \tau)}{dz^2} + \frac{1}{4z^2} \hat{v}(z, \tau) = i\tau \hat{v}(z, \tau); \quad \tau \geq 0, \quad r_1 \leq z \leq r_2, \quad (19)$$

$$\hat{v}(r_1, \tau) = 0, \quad \tau \geq 0, \quad (20)$$

$$\hat{v}(r_0, \tau) = \hat{f}(\tau) \sqrt{r_0}, \quad \tau \geq 0. \quad (21)$$

Далее, пусть

$$z = \theta + r_1, \quad \hat{v}(\theta + r_1, \tau) = \hat{w}(\theta, \tau). \quad (22)$$

Тогда из (19)–(22) имеем

$$\frac{d^2 \hat{w}(\theta, \tau)}{d\theta^2} + \frac{1}{4(\theta + r_1)^2} \hat{w}(\theta, \tau) = i\tau \hat{w}(\theta, \tau); \quad \tau \geq 0, \quad 0 \leq \theta \leq r_2 - r_1, \quad (23)$$

$$\hat{w}(0, \tau) = 0, \quad \tau \geq 0, \quad (24)$$

$$\hat{w}(r_0 - r_1, \tau) = \hat{f}(\tau) \sqrt{r_0}, \quad \tau \geq 0, \quad r_1 \leq r_0 \leq r_2. \quad (25)$$

В работе [1] указано, что решение задачи (23), (24) линейно зависит от решения задачи

$$\frac{d^2 e(\theta, \tau)}{d\theta^2} + \frac{1}{4(\theta + r_1)^2} e(\theta, \tau) = i\tau e(\theta, \tau); \quad \tau \geq 0, \quad 0 \leq \theta \leq r_2 - r_1, \quad (26)$$

$$e(0, \tau) = 0, \quad \tau \geq 0, \quad (27)$$

$$e'_\theta(0, \tau) = 1, \quad \tau \geq 0, \quad (28)$$

то есть имеет место соотношение

$$\hat{w}(\theta, \tau) = l(\tau)e(\theta, \tau), \quad \tau \geq 0, \theta \in [0, r_2 - r_1], \quad (29)$$

где $l(\tau)$ – произвольная функция.

Используя (25), находим

$$l(\tau) = \frac{\hat{f}(\tau)\sqrt{r_0}}{e(r_0 - r_1, \tau)}, \quad \tau \geq 0. \quad (30)$$

Из (18), (22), (29), (30) следует, что

$$\hat{u}(z, \tau) = \frac{\hat{f}(\tau)\sqrt{r_0}}{e(r_0 - r_1, \tau)} e^{(z - r_1, \tau)z^{-\frac{1}{2}}}, \quad z \in [r_1, r_2], \tau \geq 0. \quad (31)$$

Тогда при $\tau \geq 0$ $\hat{u}(r_2, \tau) = \frac{\hat{f}(\tau)\sqrt{r_0}}{e(r_0 - r_1, \tau)\sqrt{r_2}} e(r_2 - r_1, \tau)$.

Теорема 1. Функция $l(\tau)$, определенная формулой (30) непрерывна при $\tau \geq 0$.

Доказательство. Так как $\hat{f}(\tau)$ и $e(r_0 - r_1, \tau)$ непрерывны при $\tau \geq 0$, то для доказательства теоремы достаточно убедиться в том, что для любого $\tau \geq 0$ $e(r_0 - r_1, \tau) \neq 0$.

Предположим противное, т.е. найдется число $\tau_0 > 0$ такое, что $e(r_0 - r_1, \tau_0) = 0$.

Рассмотрим пространство $H_0 = L_2[0, r_0 - r_1]$ над полем комплексных чисел и оператор $A_1 : H_0 \rightarrow H_0$, определяемый формулами

$$A_1 u = \frac{d^2 u}{d\theta^2} + \frac{1}{4(\theta + r_1)^2} u; \quad u \in D(A_1), \quad (32)$$

$$D(A_1) = \{u : u, A_1 u \in H_0, u(0) = u(r_0 - r_1) = 0\}. \quad (33)$$

Из (32), (33) следует, что оператор A_1 самосопряжен, поэтому согласно [2] его спектр $Sp(A_1) \subset \mathbb{R}$.

Из (26) следует, что $A_1 e(\theta, \tau_0) = i\tau_0 e(\theta, \tau_0)$; $0 \leq \theta \leq r_0 - r_1$.

Точка $i\tau_0$ не принадлежит спектру оператора A_1 , следовательно, уравнение $(A_1 - i\tau_0 I)e(\theta, \tau_0) = 0$ имеет единственное решение $e(\theta, \tau_0) = 0$ при всех $0 \leq \theta \leq r_0 - r_1$. Значит и $e'_\theta(0, \tau_0) = 0$, что противоречит условию (28). Теорема доказана.

Замечание: при доказательстве теоремы мы считали, что нулевая точка не принадлежит спектру оператора A_1 . Следуя теоремам и определениям из [2, 3], для этого достаточно, варьируя r_1 , добиться выполнения одного из неравенств: $\inf_{\|u\|=1} (A_1 u, u) > 0$ или $\sup_{\|u\|=1} (A_1 u, u) < 0$.

3. Оценка по порядку для решения задачи (26)–(28). Перепишем уравнение (26) в виде $\frac{d^2 e(\theta, \tau)}{d\theta^2} - i\tau e(\theta, \tau) = -\frac{1}{4(\theta + r_1)^2} e(\theta, \tau)$. Решая полученное уравнение методом вариации постоянных и, используя условия (27), (28), сведем задачу (26)–(28) к следующему интегральному уравнению

$$e_1(\theta, \lambda) = \frac{\text{sh } \mu_0 \lambda \theta}{\mu_0 \lambda} - \int_0^\theta \frac{\text{sh } \mu_0 \lambda (\theta - \xi)}{\mu_0 \lambda} \frac{1}{4(\xi + r_1)^2} e_1(\xi, \lambda) d\xi, \quad (34)$$

где $\mu_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + i)$, $\theta, \xi \in [0, r_2 - r_1]$, $\lambda = \sqrt{\tau} \geq 0$, $e_1(\theta, \lambda) = e(\theta, \tau)$.

Теорема 2. Существуют числа $\lambda_0 > 0$, $c_1 > 0$, $c_2 > 0$ такие, что для любого $\lambda \geq \lambda_0$ выполняется

$$\text{неравенство: } c_1 \frac{e^{\frac{\theta}{\sqrt{2}}\lambda}}{\lambda} \leq |e_1(\theta, \lambda)| \leq c_2 \frac{e^{\frac{\theta}{\sqrt{2}}\lambda}}{\lambda}.$$

Доказательство. Выполним замену $\varepsilon(\theta, \lambda) = \frac{\mu_0 \lambda}{\text{sh } \mu_0 \lambda \theta} e_1(\theta, \lambda)$, тогда уравнение (34) придет к виду

$$\varepsilon(\theta, \lambda) = 1 - \int_0^\theta \frac{\text{sh } \mu_0 \lambda (\theta - \xi) \text{sh } \mu_0 \lambda \xi}{\mu_0 \lambda \text{sh } \mu_0 \lambda \theta} \frac{1}{4(\xi + r_1)^2} \varepsilon(\xi, \lambda) d\xi. \quad (35)$$

Функция $\frac{1}{4(\theta + r_1)^2}$ непрерывна при всех $\theta \in [0, r_2 - r_1]$, следовательно, найдется постоянная $c > 0$ такая, что $\frac{1}{4(\theta + r_1)^2} \leq c$.

Далее, при $\lambda \rightarrow \infty$ $\left| \frac{\text{sh } \mu_0 \lambda (\theta - \xi) \text{sh } \mu_0 \lambda \xi}{\mu_0 \lambda \text{sh } \mu_0 \lambda \theta} \right| \rightarrow 0$, поэтому для любого $\alpha > 0$ найдется $\lambda_0 > 0$ такое, что для всех $\lambda \geq \lambda_0$ $\left| \frac{\text{sh } \mu_0 \lambda (\theta - \xi) \text{sh } \mu_0 \lambda \xi}{\mu_0 \lambda \text{sh } \mu_0 \lambda \theta} \right| < \alpha$.

Обозначим $q = \int_0^\theta \left| \frac{\text{sh } \mu_0 \lambda (\theta - \xi) \text{sh } \mu_0 \lambda \xi}{\mu_0 \lambda \text{sh } \mu_0 \lambda \theta} \right| \frac{1}{4(\xi + r_1)^2} d\xi$. Тогда в силу полученных оценок будем иметь: $q < \alpha c (r_2 - r_1)$. Поскольку α – любое, то его можно подобрать таким образом, чтобы величина q оказалась строго меньше $1/2$.

Покажем, что решение уравнения (35) можно искать в виде $\varepsilon(\theta, \lambda) = \sum_{v=0}^\infty \varepsilon_v(\theta, \lambda)$, где

$$\varepsilon_0(\theta, \lambda) = 1, \quad \varepsilon_{v+1}(\theta, \lambda) = - \int_0^\theta \frac{\text{sh } \mu_0 \lambda (\theta - \xi) \text{sh } \mu_0 \lambda \xi}{\mu_0 \lambda \text{sh } \mu_0 \lambda \theta} \frac{1}{4(\xi + r_1)^2} \varepsilon_v(\xi, \lambda) d\xi.$$

Применяя индукцию по v , можно показать, что $|\varepsilon_v(\theta, \lambda)| \leq q^v$, где $v = 0, 1, 2, \dots$

Поскольку $q < 1$, то ряд $\sum_{v=0}^\infty \varepsilon_v(\theta, \lambda)$ равномерно и абсолютно сходится при $\theta \in [0, r_2 - r_1]$, $\lambda \geq \lambda_0$ и его сумма $\varepsilon(\theta, \lambda)$ равномерно ограничена при $\lambda \rightarrow \infty$.

Таким образом, получаем:

$$1 - \frac{q}{1 - q} \leq |\varepsilon(\theta, \lambda)| \leq \frac{1}{1 - q}. \quad (36)$$

Поскольку $\frac{\text{sh } \mu_0 \lambda \theta}{\mu_0 \lambda} \varepsilon(\theta, \lambda) = e_1(\theta, \lambda)$ и $\left| \frac{\text{sh } \mu_0 \lambda \theta}{\mu_0 \lambda} \right| \sim \frac{1}{2} e^{\frac{\lambda \theta}{\sqrt{2}}}$ при $\lambda \rightarrow \infty$, то из (36) находим:

$$c_1 \frac{e^{\frac{\theta}{\sqrt{2}}\lambda}}{\lambda} \leq |e_1(\theta, \lambda)| \leq c_2 \frac{e^{\frac{\theta}{\sqrt{2}}\lambda}}{\lambda}.$$

Теорема доказана.

4. Оценка приближенного значения функции $l(\tau)$. В силу изометричности преобразования Фурье F , определенного формулой (14) и в силу оценки (12) имеем

$$\|\widehat{f}_\delta(\tau) - \widehat{f}_0(\tau)\|_{L_2} \leq \delta, \quad (37)$$

где $\widehat{f}_\delta(\tau) = F[f_\delta(t)]$, $\widehat{f}_0(\tau) = F[f_0(t)]$.

Далее, пусть $l_0(\tau) = \frac{\widehat{f}_0(\tau)\sqrt{r_0}}{e^{(r_0-r_1)\tau}}$, $l_\delta(\tau) = \frac{\widehat{f}_\delta(\tau)\sqrt{r_0}}{e^{(r_0-r_1)\tau}}$. Тогда

$$\|l_\delta(\tau) - l_0(\tau)\|_{L_2}^2 = \int_0^{\lambda_0^2} \frac{r_0}{e^{2(r_0-r_1)\tau}} |\widehat{f}_\delta(\tau) - \widehat{f}_0(\tau)|^2 d\tau + \int_{\lambda_0^2}^{\infty} \frac{r_0}{e^{2(r_0-r_1)\tau}} |\widehat{f}_\delta(\tau) - \widehat{f}_0(\tau)|^2 d\tau.$$

Поскольку функция $e^{(r_0-r_1)\tau}$ непрерывна для всех $\tau \geq 0$ и из теоремы 1 следует, что она нигде не обращается в нуль, то $\frac{r_0}{e^{2(r_0-r_1)\tau}}$ непрерывна при $\tau \in [0, \lambda_0^2]$, значит на этом отрезке

она достигает своего наибольшего значения, то есть $\frac{r_0}{e^{2(r_0-r_1)\tau}} \leq c_3^2$, где

$$c_3^2 = \max_{\tau \in [0, \lambda_0^2]} \left\{ \frac{r_0}{e^{2(r_0-r_1)\tau}} \right\}.$$

Тем самым из (37) следует

$$\int_0^{\lambda_0^2} \frac{r_0}{e^{2(r_0-r_1)\tau}} |\widehat{f}_\delta(\tau) - \widehat{f}_0(\tau)|^2 d\tau \leq c_3^2 \delta^2 \quad (38)$$

Из теоремы 2 следует, что $\frac{r_0}{e^{2(r_0-r_1)\tau}} \leq \frac{r_0 \tau}{c_1 e^{\sqrt{2(r_0-r_1)}\sqrt{\tau}}}$ при $\tau \in [\lambda_0^2, \infty)$. Так как

$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{r_0 \tau}{c_1 e^{\sqrt{2(r_0-r_1)}\sqrt{\tau}}} = 0$, то при $\tau \rightarrow \infty$ функция $\frac{r_0 \tau}{c_1 e^{\sqrt{2(r_0-r_1)}\sqrt{\tau}}}$ ограничена, то есть существует $c_4 > 0$

такая, что $\frac{r_0 \tau}{c_1 e^{\sqrt{2(r_0-r_1)}\sqrt{\tau}}} \leq c_4^2$.

Тем самым

$$\int_{\lambda_0^2}^{\infty} \frac{r_0}{e^{2(r_0-r_1)\tau}} |\widehat{f}_\delta(\tau) - \widehat{f}_0(\tau)|^2 d\tau \leq c_4^2 \delta^2 \quad (39)$$

Из (38), (39) следует, что

$$\|l_\delta(\tau) - l_0(\tau)\|_{L_2} \leq \delta \sqrt{c_3^2 + c_4^2} \quad (40)$$

5. Метод проекционной регуляризации. Используя формулу (29) и обозначив $\widehat{w}(r_2 - r_1, \tau) = \widehat{w}(\tau)$, перепишем нашу задачу в виде операторного уравнения

$$A\widehat{w}(\tau) = \frac{1}{e^{(r_2-r_1)\tau}} \widehat{w}(\tau) = l_\delta(\tau), \quad (41)$$

где $A: \overline{H} \rightarrow \overline{H}$.

Из теоремы 1 и формулы (41) следует инъективность операторов A и A^* , поэтому в силу леммы 6, сформулированной в работе [4], существует изометрический оператор $Q: \overline{H} \rightarrow \overline{H}$ такой, что $A\widehat{w}(\tau) = QC\widehat{w}(\tau)$, где

$$C\widehat{w}(\tau) = \left| \frac{1}{e^{(r_2-r_1)\tau}} \right| \widehat{w}(\tau), \quad (42)$$

то есть оператор C положителен и самосопряжен.

Таким образом, уравнение (41) может быть сведено к виду

$$C\hat{w}(\tau) = \hat{l}_\delta(\tau), \tag{43}$$

в котором $\hat{l}_\delta(\tau) = Q^*l_\delta(\tau)$, а Q^* – оператор, сопряженный с $Q(\tau) = \frac{|e(r_2 - r_1, \tau)|}{e(r_2 - r_1, \tau)}$.

Пусть $\hat{w}_0(\tau) \in W_2^1[0, \infty]$ – точное решение задачи, тогда пусть найдется постоянная $a > 0$ такая, что $\|\hat{w}_0\|_{L_2}^2 + \|\hat{w}'_0\|_{L_2}^2 \leq a^2$. Значит, в частности $\|\hat{w}'_0\|_{L_2}^2 \leq a^2$.

$$\text{Определим } \hat{w}_0(\tau) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty w_0(t)e^{-it\tau} dt. \text{ Тогда } \hat{w}'_0(\tau) = i\tau \sqrt{\frac{2}{\pi}} \int_0^\infty w_0(t)e^{-it\tau} dt = i\tau \hat{w}_0(\tau).$$

Таким образом, при $\hat{l}_0(\tau) = Q^*l_0(\tau)$ уравнение (43) имеет точное решение $\hat{w}_0(\tau) \in B\bar{S}_a$, где $\bar{S}_a = \{\hat{\gamma} : \hat{\gamma} \in \bar{H}, \|\hat{\gamma}\| \leq a\}$ и $B\hat{\gamma}(\tau) = \frac{1}{i\tau}\hat{\gamma}(\tau), \tau > 0$.

Из последнего равенства и леммы 6, сформулированной в работе [4] следует существование изометрического оператора $Q_1 : \bar{H} \rightarrow \bar{H}$ такого, что $B\hat{\gamma}(\tau) = B_1Q_1\hat{\gamma}(\tau)$, где $\hat{\gamma}(\tau) \in \bar{H}$, а

$$B_1\hat{\rho}(\tau) = \frac{1}{\tau}\hat{\rho}(\tau), \tau > 0, \hat{\rho}(\tau) \in \bar{H}. \tag{44}$$

Таким образом, в силу изометричности Q_1 точное решение $\hat{w}_0(\tau) \in B_1\bar{S}_a$.

Из (43), (44) следует, что

$$B_1 = g(C). \tag{45}$$

Из теоремы 2: $C \sim \frac{\tau}{e^\tau}$ при $\tau \rightarrow \infty$. Переобозначив $\sigma = \frac{\tau}{e^\tau}$ и используя (44) и (45), получим

$$g(\sigma) \sim \ln^{-1}\left(\frac{1}{\sigma}\right) \text{ при } \sigma \rightarrow 0. \tag{46}$$

Используя метод проекционной регуляризации, предложенный в [4], регуляризуем исходные данные задачи $(\hat{l}_\delta(\tau), \delta)$, то есть определим функцию $\hat{l}_\delta[\tau, \hat{\alpha}(\delta)]$ следующим образом:

$$1) \text{ при условии } \|\hat{l}_\delta\| > 3\sqrt{c_3^2 + c_4^2}\delta \quad \hat{l}_\delta[\tau, \hat{\alpha}(\delta)] = \begin{cases} \hat{l}_\delta(\tau) & \text{при } \tau \leq \hat{\alpha}(\delta) \\ 0 & \text{при } \tau > \hat{\alpha}(\delta) \end{cases}, \text{ где } \hat{\alpha}(\delta) \text{ удовлетво-}$$

ряет уравнению $\int_{\hat{\alpha}(\delta)}^\infty |\hat{l}_\delta(\tau)|^2 d\tau = 9(c_3^2 + c_4^2)\delta^2$.

$$2) \text{ при условии } \|\hat{l}_\delta\| \leq 3\sqrt{c_3^2 + c_4^2}\delta \quad \hat{l}_\delta[\tau, \hat{\alpha}(\delta)] \equiv 0.$$

При выполнении условий 1)–2) функция $\hat{l}_\delta[\tau, \hat{\alpha}(\delta)]$ определяется однозначно даже в случае неединственности решения уравнения в условии 1).

Далее, приближенное решение $\hat{w}_\delta(\tau)$ уравнения (43) определим формулой

$$\hat{w}_\delta(\tau) = C^{-1}\hat{l}_\delta[\tau, \hat{\alpha}(\delta)], \tag{47}$$

где оператор C определен формулой (43), а $\hat{l}_\delta[\tau, \hat{\alpha}(\delta)]$ – условиями 1), 2).

В силу того, что $\hat{w}_0(\tau) \in B_1\bar{S}_a$ и (45), (46), найдется постоянная c_5 такая, что справедлива оценка

$$\|\hat{w}_\delta - \hat{w}_0\| \leq c_5 \ln^{-1}\left(\frac{1}{\delta}\right). \tag{48}$$

Из теоремы, сформулированной в работе [4] следует, что оценка (48) является точной по порядку на классе $B_1 \bar{S}_a$, а соответствующий метод проекционной регуляризации оптимален по порядку на этом классе решений.

Чтобы окончательно получить приближенное решение $u_\delta(t)$ исходной задачи (6)–(9) (а значит и (1)–(4)), используем сначала формулы (18), (22) и выведем оценку

$$\|\hat{u}_\delta - \hat{u}_0\| \leq \frac{c_s}{\sqrt{r_2}} \ln^{-1} \left(\frac{1}{\delta} \right),$$

а затем, применив обратное к F преобразование F^{-1} , получим $u_\delta(t) = \operatorname{Re} \left\{ F^{-1} \left[\hat{u}_\delta(\tau) \right] \right\}$. Поскольку преобразование F изометрично, то для приближенного решения $u_\delta(t)$ последняя оценка остается в силе.

Литература

1. Танана, В.П. Об оптимальном по порядку методе решения одной обратной задачи для параболического уравнения / В.П. Танана // Докл. РАН. – 2006. – Т. 407, № 3. – С. 316–318.
2. Колмогоров, А.Н. Элементы теории функций и функционального анализа / А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин. – М.: Наука, 1972. – 496 с.
3. Наймарк, М.А. Линейные дифференциальные операторы / М.А. Наймарк. – М.: Наука, 1969. – 529 с.
4. Танана, В.П. Об оптимальности по порядку метода проекционной регуляризации при решении обратных задач / В.П. Танана // Сиб. журн. индустр. матем. – 2004. – Т. 7, № 2. – С. 117–132.
5. Ватсон, Г.Н. Теория бесселевых функций. Часть первая / Г.Н. Ватсон. – М.: Изд-во иностранной литературы, 1949. – 748 с.

Поступила в редакцию 29 мая 2007 г.

О ЗАМКНУТЫХ ПОДМНОЖЕСТВАХ В U -ОДНОРОДНЫХ ПРОСТРАНСТВАХ ПЕРВОЙ КАТЕГОРИИ

С.В. Медведев

В заметке описывается некоторый класс нульмерных метрических пространств, которые можно вложить в качестве замкнутого нигде не плотно подмножества в u -однородное пространство первой категории.

Все пространства, рассматриваемые в статье, предполагаются нульмерными метрическими.

В классической дескриптивной теории множеств большое внимание уделяется борелевским, аналитическим и проективным множествам. В частности, для изучения некоторых свойств универсальных множеств оказались полезными топологические методы исследования. С одной стороны, универсальные множества часто обладают некоторой однородной структурой, а с другой стороны, универсальность пространства X понимается с точки зрения возможности вложения в X пространств, принадлежащих некоторому классу множеств. Поэтому представляет интерес описание класса пространств, которые можно вложить замкнутым образом в u -однородное пространство.

Определения и обозначения. Основные определения и обозначения – стандартные [1].

Нульмерное метрическое пространство называется u -однородным, если в нем любое непустое открыто-замкнутое подмножество содержит замкнутое подмножество, которое гомеоморфно всему пространству. Запись $X \approx Y$ означает, что пространства X и Y – гомеоморфные. $w(X)$ – вес пространства X . Чертой сверху \bar{F} обозначается замыкание множества F в пространстве X . Для индексированной системы множеств $\tau = \{U_\alpha: \alpha \in A\}$ из пространства X через $|\tau|$ обозначается мощность семейства τ , $\cup \tau = \cup \{U_\alpha: \alpha \in A\}$, $\text{mesh}(\tau)$ – мелкость семейства τ (верхняя грань диаметров множеств из τ). Используем обозначение: $\omega = \{0, 1, 2, \dots\}$.

Для пространства X положим $F(X) = \{Y - \text{пространство: } Y \text{ гомеоморфно некоторому непустому замкнутому множеству из } X\}$. Пусть $LF(X) = \{Y - \text{пространство: любая точка из } Y \text{ лежит в некоторой открыто-замкнутой окрестности, принадлежащей семейству } F(X)\}$. Далее, введем класс пространств $\sigma LF(X) = \{Y: \text{пространство } Y \text{ представимо в виде } Y = \cup \{Y_n: n \in \omega\}, \text{ причем каждое множество } Y_n \text{ замкнуто в } Y \text{ и } Y_n \in LF(X)\}$. Если $\dim X = 0$, то из теоремы о счетной сумме [1, с. 293] вытекает, что $\dim Y = 0$ для любого пространства $Y \in \sigma LF(X)$. Через $H_0(X)$ обозначим семейство всех замкнутых нигде не плотных множеств из X . Пусть $H(X) = \{Y: Y \approx Z, \text{ где } Z \in H_0(X)\}$.

Лемма 1. Пусть пространство $Y \in \sigma LF(X)$ для некоторого u -однородного пространства X первой категории, причем $w(X) = k$ и $w(Y) \leq k$. Тогда пространство Y представимо в виде конечной или счетной суммы замкнутых множеств, каждое из которых гомеоморфно некоторому замкнутому нигде не плотному (в X) множеству из X .

Доказательство. По определению $Y = \cup \{Y_n: n \in \omega\}$, где каждое множество Y_n замкнуто в Y и $Y_n \in LF(X)$. Тогда $\dim Y_n = 0$ для любого $n \in \omega$.

Зафиксируем индекс n . Для каждой точки $y \in Y_n$ выберем такую открыто-замкнутую окрестность $U(y)$, что $U(y) \in F(X)$. В покрытие $\{U(y): y \in Y_n\}$ множества Y_n впишем дискретное подпокрытие $\{U_\alpha: \alpha \in A\}$ мощности $|A| \leq k$.

Выберем дискретное покрытие $\{X_\alpha: \alpha \in k\}$ пространства X мощности k . В силу u -однородности пространства X для каждого $\alpha \in A$ существует такое замкнутое множество $Z_\alpha \subset X_\alpha$, что $U_\alpha \approx Z_\alpha$; положим $Z_n = \cup \{Z_\alpha: \alpha \in A\}$. Тогда множество Z_n замкнуто в X и $Z_n \approx Y_n$; пусть $f_n: Z_n \rightarrow Y_n$ – некоторый гомеоморфизм. Так как X – пространство первой категории, то $X = \cup \{X_m: m \in \omega\}$, где каждое X_m нигде не плотно в X , причем без ограничения общности можно считать, что каждое X_m замкнуто в X . Тогда при любых n и m множество $Z_n \cap X_m$ замкнуто и нигде не плотно в X (в частности, $Z_n \cap X_m$ может оказаться пустым множеством). Множества $Y_{n,m} = f_n(Z_n \cap X_m)$ замкну-

ты в Y_n , значит, и в пространстве Y . Но $Y_n = \cup \{Y_{n,m}: m \in \omega\}$, следовательно, $Y = \cup \{Y_{n,m}: n \in \omega, m \in \omega\}$. Счетное семейство множеств $\{Y_{n,m}: n \in \omega, m \in \omega\}$ – искомое. Лемма 1 доказана.

Опишем построение изоморфных систем остаточных множеств; похожая конструкция применялась автором в [2].

Пусть даны два нульмерных метрических пространства X_i с метрикой d_i , $i = 1, 2$; без ограничения общности можно считать, что диаметр множества X_i в метрике d_i меньше 1. Пусть F_1 – замкнутое множество в X_1 , B_1 – граница множества F_1 , тогда $B_1 \in H_0(X_1)$. В дальнейшем мы будем предполагать, что множество B_1 не пусто, или, эквивалентно, что множество F_1 не является открыто-замкнутым в X_1 . Пусть F_2 – замкнутое нигде не плотное множество в X_2 ; и пусть дан гомеоморфизм $f: F_1 \rightarrow F_2$; тогда множество $B_2 = f(B_1) \in H_0(X_2)$. При выполнении этих предположений можно построить [2] последовательность покрытий $\tau_{1,n} = \{V_{1,\alpha,n}: \alpha \in A_n\}$ множества B_1 и последовательность покрытий $\tau_{2,n} = \{V_{2,\alpha,n}: \alpha \in A_n\}$ множества B_2 , которые удовлетворяют следующим условиям для любых $n \in \omega$ и $i = 1, 2$:

- s1) семейство $\tau_{i,n}$ дискретно в X_i и состоит из открыто-замкнутых множеств пространства X_i ;
- s2) $\text{mesh}(\tau_{i,n}) < 2^{-n}$ в метрике d_i ;
- s3) покрытие $\tau_{i,n+1}$ измельчает покрытие $\tau_{i,n}$;
- s4) $B_i \cup (X_i \setminus F_i) \subset \cup \tau_{i,0}$;
- s5) $\cup \tau_{i,n}$ – открыто-замкнутая окрестность множества B_i и $\cap \{\cup \tau_{i,n}: n \in \omega\} = B_i$;
- s6) множество $U_{i,\alpha,n} = V_{i,\alpha,n} \setminus (F_i \cup (\cup \tau_{i,n+1}))$ не пусто для любого $\alpha \in A_n$; в частности, $U_{i,\alpha,n} \cap F_i = \emptyset$;
- s7) $\cup \{U_{i,\alpha,n}: \alpha \in A_n, n \in \omega\} = X_i \setminus F_i$;
- s8) $\text{mesh}(\{U_{i,\alpha,n}: \alpha \in A_n, n \in \omega\}) < 2^{-n}$ в метрике d_i ;
- s9) $f(V_{1,\alpha,n} \cap B_1) = V_{2,\alpha,n} \cap B_2$ для любого $\alpha \in A_n$.

Семейство множеств $\{B_i \cap V_{i,\alpha,n}: \alpha \in A_n, n \in \omega\}$ образует обычную базу пространства B_i , $i = 1, 2$. Семейство $\{\tau_{i,n}: n \in \omega\}$ будем называть *внешней базой* множества F_i , а семейство $\mathfrak{A}_i = \{U_{i,\alpha,n}: \alpha \in A_n, n \in \omega\}$ – *системой остаточных множеств* для множества F_i в пространстве X_i , $i = 1, 2$. Определим биекцию $\psi: \mathfrak{A}_1 \rightarrow \mathfrak{A}_2$ между системами остаточных множеств по правилу $\psi(U_{1,\alpha,n}) = U_{2,\alpha,n}$ для любых $\alpha \in A_n, n \in \omega$. В этом случае будем говорить, что системы \mathfrak{A}_1 и \mathfrak{A}_2 остаточных множеств в пространствах X_1 и X_2 соответственно связаны биекцией ψ и согласованы с гомеоморфизмом $f: F_1 \rightarrow F_2$. Сами системы \mathfrak{A}_1 и \mathfrak{A}_2 будем называть *изоморфными*.

Отметим важное свойство изоморфных систем остаточных множеств [2].

Лемма 2. Пусть в пространстве X_1 дана последовательность остаточных множеств $\{U_i \in \mathfrak{A}_1: i \in \omega\}$. Выберем произвольно точки $x_i \in U_i$ и точки $y_i \in \psi(U_i)$, $i \in \omega$. Пусть точка $x \in B_1$ и $y = f(x) \in B_2$. Тогда последовательность точек $\{x_i: i \in \omega\}$ сходится к точке x в пространстве X_1 тогда и только тогда, когда последовательность точек $\{y_i: i \in \omega\}$ сходится к точке y в пространстве X_2 .

Лемма 3. Пусть пространство $Y = Y_1 \cup Y_2$, причем множество Y_i замкнуто в Y и $Y_i \in H(X)$ для некоторого u -однородного пространства X , $i = 1, 2$. Тогда $Y \in H(X)$.

Доказательство. Зафиксируем гомеоморфизмы $f_i: Y_i \rightarrow X$ такие, что $f_i(Y_i)$ – замкнутые непересекающиеся нигде не плотные множества в X , $i = 1, 2$. Положим $F_1 = Y_1$; тогда границей множества F_1 будет множество $B_1 = Y_1 \cap \overline{Y_2 \setminus Y_1}$. Так как f_1 – гомеоморфизм, то множество $F_2 = f_1(F_1) \in H_0(X)$.

Если множество B_1 пустое, то множество $Y_2 \setminus Y_1$ – замкнутое и искомое вложение $f: Y \rightarrow X$ определяется по правилу $f(y) = f_1(y)$, если $y \in Y_1$, и $f(y) = f_2(y)$, если $y \in Y_2 \setminus Y_1$.

Рассмотрим случай $B_1 \neq \emptyset$. Используем обозначения из определения изоморфных систем остаточных множеств. В пространстве Y построим систему остаточных множеств \mathfrak{A}_1 для множества F_1 , а в пространстве X – систему остаточных множеств \mathfrak{A}_2 для множества $F_2 = f_1(F_1)$. Тогда $\cup \mathfrak{A}_1 = Y_2 \setminus Y_1$. Пусть $\psi: \mathfrak{A}_1 \rightarrow \mathfrak{A}_2$ – соответствующая биекция между системами остаточных множеств, согласованная с гомеоморфизмом $f: F_1 \rightarrow F_2$.

Так как пространство X – u -однородное, то для любых индексов $\alpha \in A_n$, $n \in \omega$ существует такое гомеоморфное вложение $\varphi_{\alpha,n}: X \rightarrow U_{2,\alpha,n}$, что множество $Z_{\alpha,n} = \varphi_{\alpha,n}(X)$ замкнуто в $U_{2,\alpha,n}$ (а, значит, и в X). Можно считать, что множества $Z_{\alpha,n}$ и $f_1(Y_1)$ не пересекаются, ведь множество $f_1(Y_1)$ нигде не плотно в X . Каждое $U_{1,\alpha,n}$ замкнуто в Y_2 , поэтому множество $W_{\alpha,n} = \varphi_{\alpha,n} \circ f_2(U_{1,\alpha,n})$ замкнуто в X и гомеоморфно множеству $U_{1,\alpha,n}$ как композиция двух гомеоморфизмов. При фиксированном n семейство $\{U_{2,\alpha,n}: \alpha \in A_n\}$ дискретно в пространстве X , поэтому множество $W_n = \cup\{W_{\alpha,n}: \alpha \in A_n\}$ замкнуто в X , гомеоморфно множеству $U_n = \cup\{U_{1,\alpha,n}: \alpha \in A_n\}$ и не пересекается с образом $f_1(Y_1)$.

Определим отображение $f: Y \rightarrow X$ следующим образом: если $y \in Y_1$, то $f(y) = f_1(y)$; если $y \in Y_2 \setminus Y_1$, то $y \in U_{1,\alpha,n}$ для некоторых индексов $\alpha \in A_n$, $n \in \omega$, тогда положим $f(y) = \varphi_{\alpha,n} \circ f_2(y)$.

Из построения следует, что образ $f(Y) = f_1(Y_1) \cup (\cup\{W_n: n \in \omega\})$. Несложно проверить, что отображение $f: Y \rightarrow f(Y)$ является биекцией. Сужение отображения f на замкнутое множество Y_1 является гомеоморфизмом по построению. Сужение f на замкнутое множество U_n также является гомеоморфизмом для любого n . Так как $U_n \cap U_m = \emptyset$ при $n \neq m$, то отображение f непрерывно в точках множества $\cup\{U_n: n \in \omega\}$. Замыкание $\overline{Y_2 \setminus Y_1} = B_1 \cup (\cup\{U_n: n \in \omega\})$. Непрерывность отображения f в точках из множества B_1 вытекает из леммы 2. Итак, сужения f на замкнутые множества Y_1 и $\overline{Y_2 \setminus Y_1}$ непрерывны, поэтому отображение $f: Y \rightarrow X$ – непрерывно. Аналогично проверяется непрерывность обратного отображения $f^{-1}: f(Y) \rightarrow Y$. Следовательно, $f: Y \rightarrow X$ – гомеоморфное вложение.

Для любых индексов $\alpha \in A_n$, $n \in \omega$ множество $U_{2,\alpha,n} \setminus W_{\alpha,n}$ является открытым как разность открытого и замкнутого множеств, поэтому множество $X \setminus f(Y) = \cup\{U_{2,\alpha,n} \setminus W_{\alpha,n}: \alpha \in A_n, n \in \omega\}$ – открытое, следовательно, образ $f(Y)$ – замкнутое множество в X . Для любых индексов $\alpha \in A_n$, $n \in \omega$ множество $W_{\alpha,n}$ является нигде не плотным подмножеством $U_{2,\alpha,n}$, семейство $\{U_{2,\alpha,n}: \alpha \in A_n, n \in \omega\}$ состоит из открытых не пересекающихся множеств, поэтому множество $\cup\{W_n: n \in \omega\} = f(Y_2 \setminus Y_1)$ нигде не плотно в X . По построению множество $f_1(Y_1) = f(Y_1)$ нигде не плотно в X , следовательно, множество $f(Y) = f(Y_1) \cup f(Y_2 \setminus Y_1)$ нигде не плотно в X как объединение двух нигде не плотных множеств. Лемма 3 доказана.

Теорема. Пусть дано u -однородное пространство X первой категории, вес $w(X) = k$. Пусть пространство $Y \in \sigma LF(X)$ и вес $w(Y) \leq k$. Тогда пространство Y гомеоморфно некоторому замкнутому нигде не плотному подмножеству из пространства X .

Доказательство. По лемме 1 множество $Y = \cup\{Y_n: n \in \omega\}$, где каждое Y_n замкнуто в Y и $Y_n \approx Z_n$ для некоторого $Z_n \in H_0(X)$. Если множество индексов $\{n: Y_n \neq \emptyset\}$ конечное, то теорема вытекает из леммы 3, примененной последовательно конечное число раз.

Далее предполагаем, что $Y_n \neq \emptyset$ для любого $n \in \omega$. Так как $\dim Y = 0$, то можно [1, с. 357] дополнительно считать, что $Y_n \cap Y_m = \emptyset$ при $n \neq m$. Так как X – пространство первой категории, то $X = \cup\{X_n: n \in \omega\}$, где каждое X_n не пустое замкнутое нигде не плотное множество в X .

Построим вложение $f: Y \rightarrow X$ по индукции.

База индукции. Положим $F_1^0 = Y_0$ и $F_2^0 = Z_0$. С учетом того, что $F_2^0 \in H_0(X)$ и что пространство X – u -однородное, можно считать, что $F_2^0 \cap X_0 = \emptyset$. Зафиксируем гомеоморфизм $f_0: F_1^0 \rightarrow F_2^0$.

Если множество F_1^0 открыто-замкнуто в Y , то пусть семейство \mathfrak{A}_1^0 состоит из одного открыто-замкнутого множества $Y \setminus F_1^0$. В пространстве X выберем открыто-замкнутое множество \tilde{V} , содержащее нигде не плотное множество $X_0 \cup F_2^0$ так, чтобы множество $\hat{V} = X \setminus \tilde{V}$ было непустым. В этом случае семейство \mathfrak{A}_2^0 состоит из одного множества \hat{V} .

Далее рассмотрим случай, когда F_1^0 не является открыто-замкнутым множеством.

Так как $F_2^0 \cap X_0 = \emptyset$, то найдутся два таких непересекающихся открыто-замкнутых множества \hat{V} и \tilde{V} , что $X_0 \subset \tilde{V}$ и $F_2^0 \subset \hat{V}$. Пусть $\mathfrak{A}_1^0 = \{U_{1,\alpha,n}^0 : \alpha \in A_n^0, n \in \omega\}$ – система остаточных множеств для множества F_1^0 в пространстве Y , а $\mathfrak{A}_2^0 = \{U_{2,\alpha,n}^0 : \alpha \in A_n^0, n \in \omega\}$ – система остаточных множеств для множества F_2^0 в пространстве \hat{V} , и $\psi_0: \mathfrak{A}_1^0 \rightarrow \mathfrak{A}_2^0$ – биекция между ними, согласованная с гомеоморфизмом $f_0: F_1^0 \rightarrow F_2^0$. При этом в обоих случаях $\cup \mathfrak{A}_1^0 = Y \setminus F_1^0$ и $X_0 \cap (\cup \mathfrak{A}_2^0) = \emptyset$.

Индуктивный переход. Допустим, что построены замкнутые множества F_1^m в пространстве Y и замкнутые нигде не плотные множества F_2^m в пространстве X и гомеоморфизмы $f_m: F_1^m \rightarrow F_2^m$; для которых выполняются следующие условия.

$$v1) Y_m \subset F_1^m;$$

$$v2) \cup \mathfrak{A}_1^m = Y \setminus F_1^m;$$

$$v3) (\cup \mathfrak{A}_2^m) \cap X_m = \emptyset; \overline{\cup \mathfrak{A}_2^m} = (\cup \mathfrak{A}_2^m) \cup F_2^m;$$

$$v4) F_i^{m-1} \subset F_i^m \text{ и } \cup \mathfrak{A}_i^m \subset \cup \mathfrak{A}_i^{m-1}, \text{ для } i = 1, 2;$$

$$v5) \text{ отображение } f_m: F_1^m \rightarrow F_2^m \text{ совпадает с отображением } f_{m-1}: F_1^{m-1} \rightarrow F_2^{m-1} \text{ на множестве } F_1^{m-1};$$

$$v6) \psi_m: \mathfrak{A}_1^m \rightarrow \mathfrak{A}_2^m \text{ – биекция между объединениями соответствующих систем остаточных}$$

множеств, согласованная с гомеоморфизмом $f_m: F_1^m \rightarrow F_2^m$.

Сделаем следующий шаг (переход от m к $m+1$).

Зафиксируем остаточное множество $U \in \mathfrak{A}_1^m$. Пусть $j = \min\{i: Y_i \cap U \neq \emptyset\}$. По индуктивному предположению $\cup\{Y_i: i \leq m\} \subset F_1^m$ и $F_1^m \cap U = \emptyset$, поэтому $j > m$. Пусть $F_{1,U} = Y_j \cap U$. Возможны два случая: граница $B_{1,U}$ множества $F_{1,U}$ является пустым или непустым множеством. Если $B_{1,U} = \emptyset$, то будем считать, что семейство $\mathfrak{A}_{1,U}$ состоит из одного открыто-замкнутого множества $U \setminus F_{1,U}$. В множестве $\psi_m(U)$ выберем открыто-замкнутое множество \tilde{V} , содержащее нигде не плотное множество $X_m \cup f_m(F_{1,U})$ так, чтобы множество $\hat{V} = \psi_m(U) \setminus \tilde{V}$ было бы непустым. В качестве семейства $\mathfrak{A}_{2,U}$ возьмем множество \hat{V} .

Далее рассмотрим случай, когда граница $B_{1,U} \neq \emptyset$. Так как X_m – нигде не плотное множество, то остаточное множество $\psi_m(U)$ можно разбить на два непустых открыто-замкнутых подмножества \tilde{V} и \hat{V} так, чтобы $\psi_m(U) \cap X_m \subset \tilde{V}$; тогда $\hat{V} \cap X_m = \emptyset$. В силу u -однородности пространства X множество \hat{V} содержит замкнутую копию пространства X , следовательно, в \hat{V} существует множество $F_{2,U} \in H_0(X)$, гомеоморфное $F_{1,U}$; пусть $f_U: F_{1,U} \rightarrow F_{2,U}$ – соответствующий гомеоморфизм. Пусть $\mathfrak{A}_{1,U}$ – система остаточных множеств для $F_{1,U}$ в пространстве U , а $\mathfrak{A}_{2,U}$ – система остаточных множеств для $F_{2,U}$ в пространстве \hat{V} , и $\psi_U: \mathfrak{A}_{1,U} \rightarrow \mathfrak{A}_{2,U}$ – биекция между ними, согласованная с гомеоморфизмом f_U . При этом $\cup \mathfrak{A}_{1,U} = U \setminus F_{1,U}$.

Пусть семейство $\mathfrak{A}_i^{m+1} = \{\mathfrak{A}_{i,U} : U \in \mathfrak{A}_i^m\}$, где $i = 1, 2$, является объединением всех систем остаточных множеств, полученных при переходе от m к $m+1$; отметим, что само \mathfrak{A}_i^{m+1} не будет системой остаточных множеств. Биекция $\psi_{m+1}: \mathfrak{A}_1^{m+1} \rightarrow \mathfrak{A}_2^{m+1}$ задается естественным образом: если остаточное множество $W \in \mathfrak{A}_{i,U}$ для некоторого $U \in \mathfrak{A}_i^m$, то $\psi_{m+1}(W) = \psi_U(W)$.

Определим множества $F_i^{m+1} = F_i^m \cup (\cup\{F_{i,U} : U \in \mathfrak{A}_i^m\})$, где $i = 1, 2$. Тогда $Y_{m+1} \subset F_1^{m+1}$; значит, свойство $v1)$ выполняется. Свойство $v2)$ выполняется: $\cup \mathfrak{A}_1^{m+1} = \cup\{U \setminus F_{1,U} : U \in \mathfrak{A}_1^m\} = Y \setminus F_1^{m+1}$, так

как по индуктивному предположению $\cup\{U: U \in \mathfrak{A}_1^m\} = \cup \mathfrak{A}_1^m = \cap F_1^m$. Вторая часть свойства $\nu 3$) доказывается с помощью леммы 2, а первая часть свойства $\nu 3$) и свойство $\nu 4$) проверяются непосредственно. Построим отображение $f_{m+1}: F_1^{m+1} \rightarrow F_2^{m+1}$ следующим образом. Если точка $y \in F_1^m$, то $f_{m+1}(y) = f_m(y)$; а если $y \in F_{1,U}$ для некоторого $U \in \mathfrak{A}_1^m$, то $f_{m+1}(y) = f_U(y)$. Поэтому свойство $\nu 5$) выполняется. По построению отображение f_{m+1} является взаимно однозначным. Сужение f_{m+1} на замкнутое множество F_1^m непрерывно по индуктивному предположению, сужение f_{m+1} на каждое замкнутое множество $F_{1,U}$ непрерывно по построению, а сужение f_{m+1} на замыкание множества $F_i^{m+1} \setminus F_i^m$ в точках из F_i^m будет непрерывным по лемме 2, следовательно, отображение f_{m+1} является непрерывным. Непрерывность обратного отображения f_{m+1}^{-1} устанавливается аналогично.

Итак, $f_{m+1}: F_1^{m+1} \rightarrow F_2^{m+1}$ – гомеоморфизм. Индуктивный переход завершен.

Пусть $F_2 = \cup\{F_2^m : m \in \omega\}$. Из условия $\nu 1$) следует, что $Y = \cup\{F_1^m : m \in \omega\}$. Определим отображение $f: Y \rightarrow X$ по формуле: $f(y) = f_m(y)$, если точка $y \in F_1^m$ для некоторого m . В силу свойства $\nu 5$) это определение является корректным. Ясно, что $f(Y) = F_2$. Так как $F_1^{m-1} \subset F_1^m$ и сужение f на каждое замкнутое множество F_1^m является гомеоморфизмом, то f – тоже гомеоморфизм.

Проверим замкнутость множества F_2 .

Допустим, что нашлась точка $x \in \overline{F_2} \setminus F_2$ и пусть $j = \min\{i: x \in X_i\}$. Из свойств $\nu 3$) и $\nu 4$) следует, что $x \notin \cup \mathfrak{A}_2^m$ при $m \geq j$, в то же время $\overline{F_2} \subset \overline{\cup \mathfrak{A}_2^j \cup F_2^j} = \cup \mathfrak{A}_2^j \cup F_2^j$, значит, $x \in F_2^j \subset F_2$. Получили противоречие с тем, $x \notin F_2$. Итак, множество F_2 замкнуто.

Возьмем произвольное открытое множество W , пересекающее множество F_2 . Выберем номер $m = \min\{i: W \cap F_2^i \neq \emptyset\}$. Возможны два случая.

Первый случай: множество $W \cap B_{2,U} \neq \emptyset$ для некоторого $U \in \mathfrak{A}_1^m$ (напомним, что $B_{2,U}$ – образ границы множества $F_{1,U}$ при гомеоморфизме f_U). Тогда из свойств $s 5$) и $s 8$) вытекает, что множество $W \cap B_{2,U}$ содержит некоторое остаточное множество V из семейства \mathfrak{A}_2^{m+1} , а в нем содержится непустое множество \hat{V} , которое не пересекается с F_2 . Поэтому, согласно одной из характеристик нигде не плотных множеств, множество F_2 будет нигде не плотным в X .

Второй случай: множество $W \cap B_{2,U} = \emptyset$ для всех $U \in \mathfrak{A}_1^m$. Тогда $D = W \cap F_2^m$ имеет открыто-замкнутую окрестность O_D , которая не пересекается с замкнутым множеством $\cup\{B_{2,U}: U \in \mathfrak{A}_1^m\}$. В силу выбора номера m можно считать, что $O_D \cap (\cup\{F_2^i: i < m\}) = \emptyset$. По построению множество F_2^m нигде не плотное, поэтому внутри множества O_D найдется непустое множество \hat{V} , которое не пересекается с F_2^m , а, следовательно, и $\hat{V} \cap F_2 = \emptyset$. Итак, и в этом случае множество F_2 оказывается нигде не плотным в X .

Теорема доказана.

Литература

1. Куратовский, К. Топология / К. Куратовский. Пер. с англ. – М.: Мир, 1966. – Т.1. – 595 с.
2. Медведев, С.В. О строении метрических h -однородных пространств / С.В. Медведев // – В кн.: Общая топология. Отображения топологических пространств. – М.: Изд-во МГУ, 1986. – С. 77–98.

Поступила в редакцию 6 сентября 2007 г.

О СХОДИМОСТИ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТИ ОПЕРАТОРОВ ВНУТРЕННЕЙ СУПЕРПОЗИЦИИ

Л.А. Минаждинова

В теории уравнений с отклоняющимся аргументом нейтрального типа важную роль играет оператор внутренней суперпозиции, действующий в лебеговом пространстве суммируемых функций. В статье рассматривается сходимость последовательности таких операторов. Функции, на которых определены операторы внутренней суперпозиции, заданы на локально компактном пространстве с мерами, определяемыми самими операторами.

Будем обозначать через R – пространство действительных чисел, T – локально компактное пространство, счетное в бесконечности, λ – положительная мера на T . Через $L_p^\lambda(T)$, $p \in [1, \infty]$ обозначим банахово пространство суммируемых в степени p относительно меры λ функций

$y: T \rightarrow R$ с нормой $\|y\|_{L_p^\lambda(T)} = \left(\int |y(t)|^p d\lambda(t) \right)^{\frac{1}{p}}$.

Пусть $T_1 \supseteq T$. Зададим отображение $\tau: T \rightarrow T_1$ и $q: T \rightarrow R$. Обозначим $E = \{t \in T: \tau(t) \in T\}$ и χ_E – характеристическая функция множества E .

Оператор внутренней суперпозиции S зададим равенством

$$(Sy)(t) = \begin{cases} q(t)y(\tau(t)), & \tau(t) \in T, \\ 0, & \tau(t) \notin T, \end{cases} \quad y: T \rightarrow R.$$

В дальнейшем оператор S нам будет удобнее записывать в виде

$$(Sy)(t) = \chi_E(t)q(t)y(\tau(t)).$$

Сужение функции /меры / f на множество A обозначим через f_A . Через $K(T)$ обозначено пространство функций $y: T \rightarrow R$ с компактным носителем.

Придерживаясь обозначений и терминологии Н. Бурбаки [3], пару (π, g) будем называть λ -приспособленной (здесь $\pi: T \rightarrow T_1$, $g: T \rightarrow R$, $g \geq 0$, λ – положительная мера на T), если функции π и g λ -измеримы и для любой функции $f \in K(T)$ отображение $t \rightarrow g(t)f(\pi(t))$ λ -интегрируемо. Всякая λ -приспособленная пара (π, g) определяет на T_1 меру μ , которая задается равенством

$$\int f(s)d\mu(s) = \int g(t)f(\pi(t))d\lambda(t), \quad f \in K(T_1).$$

Меру μ будем обозначать через $\pi(g\lambda)$.

Приведем теорему из [4], условия которой обеспечивают действие оператора внутренней суперпозиции.

Теорема 1. Пусть $p \in [1, \infty]$, λ – положительная мера на T , пара $(\tau_E, |q_E|^p)$ λ_E -приспособлена и $|q_E|^p$ ограничена. Пусть далее существуют такие неотрицательные числа α , Δ , что для любого λ -измеримого множества $A \subset T$ множество $\tau^{-1}(A) \cap \{t \in E: |q(t)| > 0\}$ λ -измеримо и

$$\lambda(\tau^{-1}(A) \cap \{t \in E: |q(t)| > 0\}) \leq \alpha\lambda(A) + \Delta.$$

Тогда 1) Существуют положительная мера ν на T и числа M такие, что пара $(\tau_E, |q_E|^p)$ ν_E -приспособлена и $\mu = \tau_E(|q_E|^p \nu_E) \leq M\nu$; 2) для любой ν -интегрируемой функции y функция $|q_E(\cdot)|^p \cdot |y(\tau_E(\cdot))|$ ν_E -интегрируема.

Следствие. В условиях теоремы 1 существует мера ν такая, что оператор внутренней суперпозиции S непрерывно отображает пространство $L_p^{\nu}(T)$ в себя.

Рассмотрим вопрос о сходимости последовательности операторов внутренней суперпозиции.

Пусть $\tau_k : T \rightarrow T_1$, $q_k : T \rightarrow R$, $E_k = \{t \in T : \tau_k(t) \in T\}$, $k = 0, 1, \dots$. Зададим операторы внутренней суперпозиции:

$$(S_k y)(t) = \chi_{E_k}(t) q_k(t) y(\tau_k(t)).$$

Здесь будем предполагать, что для числа $p \in [1, \infty]$ и положительной меры λ пары $(\tau_{kE_k}, |q_{kE_k}|^p)$ λ_{E_k} -приспособлены и $|q_{kE_k}|^p$ ограничены. Далее, существуют такие числа α_k и Δ_k , что для любого λ -измеримого множества $A \subset T$ множество $\tau_k^{-1}(A) \cap \{t \in E_k : |q_k(t)| > 0\}$ λ -измеримо и

$$\lambda(\tau_k^{-1}(A) \cap \{t \in E_k : |q_{kE_k}(t)| > 0\}) \leq \alpha_k \lambda(A) + \Delta_k, \quad k = 0, 1, \dots$$

Как следует из теоремы 1 для каждого $k = 0, 1, \dots$, существует мера ν_k такая, что оператор $S_k : L_p^{\nu_k}(T) \rightarrow L_p^{\nu_k}(T)$ непрерывен и существуют ограниченный в существенном относительно ν_k производные $\frac{d\mu_k}{d\nu_k}$, где $\mu_k = \tau_{E_k}(|q_{kE_k}|^p \nu_k)$.

Лемма 1. Пусть T – локально компактное пространство, $f : T \rightarrow R$ – непрерывная функция с компактным носителем K_f . Тогда f равномерно непрерывна на T .

Доказательство. На T существует компактификация Александрова [1]. Обозначим ее T' . Тогда $T' = T \cup \{\infty\}$ и T' – компактное пространство. Топология T' такова, что открытыми окрестностями точек из $T \subset T'$ являются те же открытые окрестности точек локально компактного пространства T , а открытыми окрестностями точки ∞ являются все дополнения $T' \setminus F$, где F – замкнутые множества из T . На компактном пространстве T' существует единственная равномерная структура U , согласующаяся с топологией в T' [1].

Функцию $f : T \rightarrow R$ продолжим на T' . $\bar{f} : T' \rightarrow R$ и $\bar{f}(x) = \begin{cases} f(x), & x \in T, \\ 0, & x = \infty. \end{cases}$

Покажем, что \bar{f} непрерывна. Непрерывность ее в любой точке $x \in T$ следует из непрерывности f . Покажем, что \bar{f} непрерывна в точке ∞ . Базу окрестностей точки $0 \in R$ задают множества $V_0^\varepsilon = \{y \in R, |y| < \varepsilon\}$, $\varepsilon > 0$. Найдем прообраз $\bar{f}^{-1}(V_0^\varepsilon) = \{x \in T', |\bar{f}(x)| < \varepsilon\}$. Открытая окрестность точки ∞ $T' \setminus K_f$ содержится в $\bar{f}^{-1}(V_0^\varepsilon)$ для любого $\varepsilon > 0$. Значит, \bar{f} непрерывна в точке ∞ , а, следовательно, и во всем пространстве T' . Тогда, функция $\bar{f} : T' \rightarrow R$, заданная на компактном пространстве T' равномерно непрерывна. Ее сужение на множество T будет также равномерно непрерывно на индуцированном равномерном пространстве T .

Лемма доказана.

Через $\tilde{\tau}_{kE_0}$ обозначим произвольное ν_0 -измеримое продолжение на множество E_0 .

Лемма 2. Пусть T – локально компактное пространство, $S_k : L_p^{\nu_k}(T) \rightarrow L_p^{\nu_k}(T)$, $k = 0, 1, \dots$. Пусть последовательность $\{\chi_{E_k} q_k\}$ сходится по мере ν_0 к $\chi_{E_0} q_0$, последовательность $\{\tau_k\}$ сходится по мере ν_0 к τ_0 и для любого компактного множества $K \subset T$ $\lim_{k \rightarrow \infty} \nu_0(K \cap (E_k \Delta E_0)) = 0$. Тогда последовательность $\{S_k y\}$ сходится по мере ν_0 к $S_0 y$ для любой функции $y \in K(T)$.

Доказательство. Пусть K – компактное множество из T , $y \in K(T)$. Обозначим $M = \max_{t \in K} |y(t)|$. Зададим произвольное $\varepsilon > 0$. Справедливо равенство

$$\begin{aligned} & \nu_0(K \cap \{t \in T : |(S_k y)(t) - (S_0 y)(t)| \geq \varepsilon\}) = \dots \\ & = \nu_0(K \cap \{t \in E_0 \Delta E_k : |(S_k y)(t) - (S_0 y)(t)| \geq \varepsilon\}) + \nu_0(K \cap \{t \in E_0 \cap E_k : |(S_k y)(t) - (S_0 y)(t)| \geq \varepsilon\}). \end{aligned}$$

Имеем $\lim_{k \rightarrow \infty} \nu_0(K \cap \{t \in E_0 \Delta E_k : |(S_k y)(t) - (S_0 y)(t)| \geq \varepsilon\}) \leq \lim_{k \rightarrow \infty} \nu_0(K \cap (E_0 \Delta E_k)) = 0$.

Далее,

$$\begin{aligned} & \nu_0(K \cap \{t \in E_0 \cap E_k : |(S_k y)(t) - (S_0 y)(t)| \geq \varepsilon\}) = \\ & = \nu_0(K \cap \{t \in E_0 \cap E_k : |q_{kE_0 \cap E_k}(t)y(\tau_{kE_0 \cap E_k}(t)) - q_{0E_0 \cap E_k}(t)y(\tau_{0E_0 \cap E_k}(t))| \geq \varepsilon\}) \leq \\ & \leq \nu_0(K \cap \{t \in E_0 \cap E_k : |q_{kE_0 \cap E_k}(t) - q_{0E_0 \cap E_k}(t)| \cdot |y(\tau_{kE_0 \cap E_k}(t))| \geq \frac{\varepsilon}{2}\}) + \\ & + \nu_0(K \cap \{t \in E_0 \cap E_k : |q_{kE_0 \cap E_k}(t)| \cdot |y(\tau_{kE_0 \cap E_k}(t)) - y(\tau_{0E_0 \cap E_k}(t))| \geq \frac{\varepsilon}{2}\}). \end{aligned}$$

По условию $\lim_{k \rightarrow \infty} \nu_0(K \cap \{t \in E_0 \cap E_k : |q_{kE_0 \cap E_k}(t) - q_{0E_0 \cap E_k}(t)| \cdot |y(\tau_{kE_0 \cap E_k}(t))| \geq \frac{\varepsilon}{2}\}) \leq$

$$\leq \lim_{k \rightarrow \infty} \nu_0(K \cap \{t \in E_0 \cap E_k : |q_{kE_0 \cap E_k}(t) - q_{0E_0 \cap E_k}(t)| \geq \frac{\varepsilon}{2M}\}) = 0.$$

Так как q_{0E_0} ν_0 -измерима, то для $K \subset T$ и любого $\delta > 0$ найдется такое компактное $K_1 \subset K$, что на K_1 q_{0E_0} непрерывна и $\sup_{t \in K} |q_{0E_0}| = Q < \infty$, $\nu_0(K - K_1) < \delta$. Тогда

$$\begin{aligned} & \nu_0(K \cap \{t \in E_0 \cap E_k : |q_{kE_0 \cap E_k}(t)| \cdot |y(\tau_{kE_0 \cap E_k}(t)) - y(\tau_{0E_0 \cap E_k}(t))| \geq \frac{\varepsilon}{2}\}) \leq \\ & \leq \delta + \nu_0(K_1 \cap \{t \in E_0 : |y(\tilde{\tau}_{kE_0 \cap E_k}(t)) - y(\tau_{0E_0 \cap E_k}(t))| \geq \frac{\varepsilon}{2Q}\}). \end{aligned}$$

Из леммы 1 следует, что функция y равномерно непрерывна на T . Значит для заданного $\varepsilon > 0$ найдется окрестность U равномерной структуры пространства T такая, что $|y(\tilde{\tau}_{kE_0 \cap E_k}(t)) - y(\tau_{0E_0 \cap E_k}(t))| < \frac{\varepsilon}{2Q}$, как только $(\tilde{\tau}_{kE_0}(t), \tau_{0E_0}(t)) \in U$.

Таким образом, учитывая сходимость $\tilde{\tau}_{kE_0}(t)$ к $\tau_{0E_0}(t)$ по мере ν_0 , можно утверждать, что для заданных $\varepsilon > 0$, $\delta > 0$ существует номер N такой, что при $n > N$ имеют место неравенства

$$\begin{aligned} & \nu_0(K \cap \{t \in E_0 \cap E_k : |q_{kE_0 \cap E_k}(t)| \cdot |y(\tau_{kE_0 \cap E_k}(t)) - y(\tau_{0E_0 \cap E_k}(t))| \geq \frac{\varepsilon}{2}\}) \leq \\ & \leq \delta + \nu_0(K_1 \cap \{t \in E_0 : (\tilde{\tau}_{kE_0}(t), \tau_{0E_0}(t)) \in U\}) < 2\delta. \end{aligned}$$

Следовательно, $\lim_{k \rightarrow \infty} \nu_0(K \cap \{t \in E_0 \cap E_k : |(S_k y)(t) - (S_0 y)(t)| \geq \varepsilon\}) = 0$ и, значит, $\{S_k y\}$ сходится по мере ν_0 к $S_0 y$ для любой функции $y \in K(T)$.

Лемма доказана.

Определение: Подмножество H из L^p_μ называется равностепенно μ -интегрируемым порядком p , если оно удовлетворяет условиям:

- 1) для любого $\varepsilon > 0$ найдется такое $\delta > 0$, что для любого μ -интегрируемого множества A , $\mu(A) < \delta$ и любого $f \in H$ следует, что $\int |f|^p \chi_A d\mu \leq \varepsilon$;
- 2) для любого $\varepsilon > 0$ найдется такое компактное множество $K \subset T$, что для любого $f \in H$ $\int |f|^p \chi_{TK} d\mu \leq \varepsilon$.

Лемма 3. Пусть T – локально компактное пространство, $S_k : L_p^{V_p}(T) \rightarrow L_p^{V_p}(T)$, $k=0,1,\dots$. Пусть последовательность $\{\chi_{E_k} q_k\}$ равномерно v_0 -интегрируема порядка p . Тогда для любой функции $y \in K(T)$ последовательность $\{S_k y\}$ равномерно v_0 -интегрируема порядка p .

Доказательство. Пусть $y \in K(T)$ и $\max_{t \in T} |y(t)| = M$. Зададим $\varepsilon > 0$ и произвольное v_0 интегрируемое множество $A \subset T$.

$$\int |S_k y|^p \chi_A dv_0 = \int |q_k(t)|^p \cdot |y(\tau_k(t))|^p \chi_{E_k \cap A} dv_0 \leq M^p \int |q_k(t)|^p \chi_{E_k \cap A} dv_0 \leq M^p \frac{\varepsilon}{M^p} = \varepsilon, \text{ при } v_0(A) < \delta,$$

так как последовательность $\{\chi_{E_k} q_k\}$ равномерно v_0 -интегрируема порядка p .

Для любого компактного множества $K \subset T$ имеем

$$\int |S_k y|^p \chi_{T \setminus K} dv_0 = \int |q_k(t)|^p \cdot |y(\tau_k(t))|^p \chi_{E_k \cap (T \setminus K)} dv_0 \leq M^p \int |q_k(t)|^p \chi_{E_k \cap (T \setminus K)} dv_0.$$

Так как последовательность $\{\chi_{E_k} q_k\}$ равномерно v_0 -интегрируема порядка p , то существует такое компактное множество $K_0 \subset T$, что для любого натурального числа k и заданного ε

$$\int |q_k(t)|^p \chi_{E_k \cap (T \setminus K)} dv_0 \leq \frac{\varepsilon}{M^p} \text{ и тогда } \int |S_k y|^p \chi_{T \setminus K} dv_0 < \varepsilon. \text{ И, значит, последовательность } \{S_k y\}$$

равномерно v_0 -интегрируема порядка p для любой функции $y \in K(T)$.

Лемма доказана.

Лемма 4. Пусть T – локально компактное пространство, $S_k : L_p^{V_p}(T) \rightarrow L_p^{V_p}(T)$, $k=0,1,\dots$

Пусть последовательность $\{\chi_{E_k} q_k\}$ сходится в пространстве $L_p^{V_0}(t)$ к $\chi_{E_0} q_0$, последовательность $\{\tau_k\}$ сходится по мере v_0 к τ_0 и для любого компактного множества $K \subset T$ $\lim_{k \rightarrow \infty} v_0(K \cap (E_k \Delta E_0)) = 0$. Тогда последовательность $\{S_k y\}$ сходится к $S_0 y$ в пространстве $L_p^{V_0}(T)$ для любой функции $y \in K(T)$.

Доказательство. Так как $\{\chi_{E_k} q_k\}$ сходится в пространстве $L_p^{V_0}(t)$ к $\chi_{E_0} q_0$, то $\{\chi_{E_k} q_k\}$ сходится по мере v_0 и равномерно v_0 -интегрируема порядка p [2]. Согласно леммам 2 и 3 последовательность $\{S_k y\}$ сходится по мере v_0 к $S_0 y$ и равномерно v_0 -интегрируема порядка p . Тогда последовательность $\{S_k y\}$ сходится к $S_0 y$ в пространстве $L_p^{V_0}(T)$ для любой функции $y \in K(T)$.

Лемма доказана.

Теорема 2. Пусть T – локально компактное пространство, $S_k : L_p^{V_p}(T) \rightarrow L_p^{V_p}(T)$, $k=0,1,\dots$

Пусть существуют положительные числа g_k^*, g_k^*, g^*, g^* такие, что для мер v_k , $k=0,1,\dots$ выполнены неравенства

$$g^* v_0 \leq g_n^* v_0 \leq v_n \leq g_n^* v_0 \leq g^* v_0, \tag{1}$$

последовательность $\text{vrai sup}_{t \in T} \frac{d\mu_k}{dv_k}(t)$ ограничена числом K^* и $\lim_{k \rightarrow \infty} v_0(K \cap (E_k \Delta E_0)) = 0$. Тогда, если последовательность $\{\chi_{E_k} q_k\}$ сходится в пространстве $L_p^{V_0}(T)$ к $\chi_{E_0} q_0$, а последовательность $\{\tau_k\}$ сходится по мере v_0 к τ_0 , то для любого $x \in L_p^{V_k}(T)$ $\lim_{k \rightarrow \infty} \|S_k x - S_0 x\|_{v_0} = 0$.

Математика

Доказательство. Из условия (1) следует, что меры ν_k абсолютно непрерывны относительно ν_0 и классы эквивалентности в пространствах $L_p^k(T)$ совпадают для всех $k=0, 1, \dots$; нормы в $L_p^k(T)$ эквивалентны.

Пусть $x \in L_p^k(T)$, тогда для любого $\varepsilon > 0$ можно подобрать непрерывную функцию \tilde{x} с компактным носителем K такую, что

$$\|x - \tilde{x}\|_{\nu_0} = \left(\int_K |x(t) - \tilde{x}(t)|^p d\nu_0 \right)^{\frac{1}{p}} \leq \left(\int_K |x(t) - \tilde{x}(t)|^p \frac{1}{g^*} d\nu_k \right)^{\frac{1}{p}} \leq \frac{1}{(g^*)^{\frac{1}{p}}} \left(\int_K |x(t) - \tilde{x}(t)|^p d\nu_k \right)^{\frac{1}{p}} \leq \frac{\varepsilon}{(g^*)^{\frac{1}{p}}}.$$

Справедливы оценки

$$\begin{aligned} \|S_k x - S_0 x\|_{\nu_0} &\leq \|S_k x - S_k \tilde{x}\|_{\nu_0} + \|S_0 x - S_0 \tilde{x}\|_{\nu_0} + \|S_k \tilde{x} - S_0 \tilde{x}\|_{\nu_0} \leq \\ &\leq (\|S_k\|_{\nu_0 \rightarrow \nu_0} + \|S_0\|_{\nu_0 \rightarrow \nu_0}) \|x - \tilde{x}\|_{\nu_0} + \|S_k \tilde{x} - S_0 \tilde{x}\|_{\nu_0}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \|S_0\|_{\nu_0 \rightarrow \nu_0} &\leq (K^*)^{\frac{1}{p}}, \text{ так как } \|S_0 x\|_{\nu_0} = \left(\int_T |(S_0 x)(t)|^p d\nu_0 \right)^{\frac{1}{p}} = \left(\int_T |\chi_{E_0} q_0(t) x(\tau_0(t))|^p d\nu_0 \right)^{\frac{1}{p}} = \\ &= \left(\int_T |x(s)|^p d\mu_0 \right)^{\frac{1}{p}} = \left(\int_T |x(s)|^p \frac{d\mu_0}{d\nu_0} d\nu_0 \right)^{\frac{1}{p}} \leq (K^*)^{\frac{1}{p}} \left(\int_T |x(s)|^p d\nu_0 \right)^{\frac{1}{p}} \leq (K^*)^{\frac{1}{p}} \|x\|_{\nu_0}. \end{aligned}$$

$$\|S_k\|_{\nu_0 \rightarrow \nu_0} \leq (K^* g^* g^{*-1})^{\frac{1}{p}}, \quad k=0, 1, \dots, \text{ так как}$$

$$\begin{aligned} \|S_k x\|_{\nu_0} &= \left(\int_T |(S_k x)(t)|^p d\nu_0 \right)^{\frac{1}{p}} = \left(\int_T |\chi_{E_k} q_k(t) x(\tau_k(t))|^p d\nu_0 \right)^{\frac{1}{p}} \leq \left(\int_T |\chi_{E_k} q_k(t) x(\tau_k(t))|^p \frac{1}{g^*} d\nu_k \right)^{\frac{1}{p}} = \\ &= \frac{1}{(g^*)^{\frac{1}{p}}} \left(\int_T |x(s)|^p d\mu_k \right)^{\frac{1}{p}} = \frac{1}{(g^*)^{\frac{1}{p}}} \left(\int_T |x(s)|^p \frac{d\mu_k}{d\nu_k} d\nu_k \right)^{\frac{1}{p}} \leq \left(\frac{K^*}{g^*} \right)^{\frac{1}{p}} \left(\int_T |x(s)|^p d\nu_k \right)^{\frac{1}{p}} \leq \\ &\leq \left(\frac{K^* g^*}{g^*} \right)^{\frac{1}{p}} \left(\int_T |x(s)|^p d\nu_0 \right)^{\frac{1}{p}} = \left(\frac{K^* g^*}{g^*} \right)^{\frac{1}{p}} \|x\|_{\nu_0}. \end{aligned}$$

По лемме 4 $\lim_{k \rightarrow \infty} \|S_k \tilde{x} - S_0 \tilde{x}\|_{\nu_0} = 0$, то есть, начиная с некоторого номера n , $\|S_k \tilde{x} - S_0 \tilde{x}\|_{\nu_0} < \varepsilon$.

Значит $\lim_{k \rightarrow \infty} \|S_k x - S_0 x\|_{\nu_0} = 0$.

Теорема доказана.

ПРИМЕР

Определим операторы S_0 и S_k , $k=0, 1, \dots$. Положим $T = [0, 1]$ и $q_k(t) = 1$, $k=0, 1, \dots$

$$\text{Зададим } \tau_0(t) = \begin{cases} t, t \in \left[0; \frac{1}{3}\right], \\ \frac{1}{3}, t \in \left(\frac{1}{3}; \frac{2}{3}\right), \\ t - \frac{1}{3}, t \in \left[\frac{2}{3}; 1\right] \end{cases} \text{ и } \tau_k(t) = \begin{cases} \frac{k+1}{k}t - \frac{1}{3k}, t \in \left[0; \frac{1}{3}\right], \\ \frac{1}{3}, t \in \left(\frac{1}{3}; \frac{2}{3}\right), \\ \frac{k+1}{k}t - \frac{k+2}{3k}, t \in \left[\frac{2}{3}; 1\right]. \end{cases} \quad k=0, 1, \dots,$$

$$E_0 = [0; 1], \quad E_k = \left[\frac{1}{3k+3}; 1\right], \quad E_0 \Delta E_k = \left[0; \frac{1}{3k+3}\right]; \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \nu_0(E_0 \Delta E_k) = 0.$$

$$v_0 = \frac{\beta}{\beta-1}m + \frac{1}{3}\varepsilon\left(\frac{1}{3}\right)\frac{\beta}{(\beta-1)^2} \text{ и } v_k = \frac{\frac{k+1}{k}\beta}{\frac{k+1}{k}\beta-1}m + \frac{1}{3}\varepsilon\left(\frac{1}{3}\right)\frac{\frac{k+1}{k}\beta}{(\beta-1)\left(\frac{\beta(k+1)}{k}-1\right)}.$$

Здесь $\varepsilon(t)$ – единичная атомическая мера, сосредоточенная в точке t и $\beta > 1$.

$$\frac{1}{2}k \leq \frac{k}{k+1}v_0 \leq v_k \leq \frac{k+1}{k}v_0 \leq 2v_0, \quad k = 0, 1, \dots$$

$$\frac{d\mu_k}{dv_k}(t) = \begin{cases} \frac{2\beta}{\frac{k+1}{k}\beta+1}, & t \neq \frac{1}{3}, \\ \beta, & t = \frac{1}{3}. \end{cases} \quad \text{vrai sup}_{t \in T} \frac{d\mu_k}{dv_k}(t) = \frac{2\beta}{\beta+1}.$$

Последовательность $\{\tau_k\}$ сходится к τ_0 в каждой точке $t \in [0;1]$, значит, последовательность $\{\tau_k\}$ сходится по мере v_0 к τ_0 .

Таким образом, условия теоремы 2 выполнены и, следовательно, последовательность операторов $S_k : L_p^{v_k}(E) \rightarrow L_p^{v_k}(T)$, заданных равенством $(S_k x) = x(\tau_k(t))$, $t \in [0,1]$ сходится по норме к оператору $(S_0 x) = x(\tau_0(t))$.

Литература

1. Бурбаки, Н. Общая топология. Основные структуры / Н. Бурбаки. – М.: Наука, 1968. – 272 С.
2. Бурбаки, Н. Интегрирование. Меры на локально компактных пространствах / Н. Бурбаки. – М.: Наука, 1977. – 600 с.
3. Бурбаки, Н. Интегрирование. Меры, интегрирование мер / Н. Бурбаки. – М.: Наука, 1967. – 396 С.
4. Плышевская, Т.К. О разрешимости функционально-дифференциальных уравнений в лебеговых пространствах / Т.К. Плышевская. – Магнитогорск: Магнитогорский горно-металлургический институт, 1988. – Деп. в ВИНТИ 22.02.89. – № 1186. – В 89.

Поступила в редакцию 20 июня 2007 г.

ОБ ОПТИМАЛЬНОМ МЕТОДЕ РЕШЕНИЯ ОДНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ТЕПЛОВОЙ ДИАГНОСТИКИ¹

В.П. Танана, Н.Ю. Колесникова

Одной из особенностей обратных задач тепловой диагностики ракетных двигателей [1] являются высокие требования, предъявляемые к точности получаемых приближённых решений. Оптимальные по порядку методы [2] не всегда удовлетворяют этим требованиям, так как не учитывают конкретную величину погрешности исходных данных. В настоящей работе предлагается оптимальный метод решения одной из таких задач.

1. Постановка задачи.

Пусть U, F, V – гильбертовы пространства, а $B[U, F]$, $B[F, U]$, и $B[V, U]$ – соответствующие пространства линейных ограниченных операторов.

Рассмотрим операторное уравнение

$$Au = f; u \in U, f \in F, \quad (1)$$

где $A \in B[U, F]$.

Обозначим через \bar{S}_r замкнутый шар в пространстве V с центром в нуле и радиуса $r > 0$, а через M_r множество, определяемое формулой

$$M_r = B\bar{S}_r,$$

где $B \in B[V, U]$.

Множество M_r будем называть классом корректности для уравнения (1), если сужение $A_{N_r}^{-1}$ оператора A^{-1} на множество $N_r = AM_r$ непрерывно в нуле [3].

В дальнейшем будем предполагать, что множество M_r является классом корректности для уравнения (1), и задачу приближенного решения этого уравнения поставим следующим образом.

Предположим, что при $f = f_0$ существует единственное решение u_0 уравнения (1), которое принадлежит множеству M_r , но точное значение правой части f_0 нам не известно, а вместо него дано некоторое приближение $f_\delta \in F$ и уровень погрешности $\delta > 0$ такие, что $\|f_\delta - f_0\| \leq \delta$. Требуется по исходным данным задачи M_r , f_δ , и δ определить приближенное решение u_δ уравнения (1) и оценить его отклонение от точного решения.

Определение 1. Семейство операторов $\{T_\delta : 0 < \delta \leq \delta_0\}$ будем называть линейным методом приближенного решения уравнения (1) на классе корректности M_r , если для любого $\delta \in (0, \delta_0]$ оператор $T_\delta \in B[F, U]$ и

$$T_\delta f_\delta \rightarrow u_0 \text{ при } \delta \rightarrow 0$$

равномерно на множестве M_r при условии $\|Au_0 - f_\delta\| \leq \delta$ [4].

Теперь для любого $\delta \in (0, \delta_0]$ введем количественную характеристику точности метода $\{T_\delta : 0 < \delta \leq \delta_0\}$ на множестве M_r :

$$\Delta_\delta(T_\delta) = \sup_{u, f_\delta} \{\|u - T_\delta f_\delta\|, u \in M_r, \|Au - f_\delta\| \leq \delta\}. \quad (2)$$

Обозначим через Δ_δ^{opt} величину

¹ Работа поддержана грантом р_урал_а № 07-01-96001

$$\Delta_{\delta}^{opt} = \inf \{ \Delta_{\delta}(P) : P \in B[F, U] \},$$

где $\Delta_{\delta}(P)$ определена формулой (2).

Определение 2: Линейный метод $\{T_{\delta}^{opt} : 0 < \delta \leq \delta_0\}$ будем называть оптимальным на классе решений M_r , если для любого $\delta \in (0, \delta_0]$ $\Delta_{\delta}(T_{\delta}^{opt}) = \Delta_{\delta}^{opt}$.

Следуя работе [5], введем модуль непрерывности в нуле $\omega(\delta, r)$ обратного оператора A^{-1} на классе M_r , который определим формулой

$$\omega(\delta, r) = \sup \{ \|u\| : u \in M_r, \|Au\| \leq \delta \}.$$

Так как множество M_r является классом корректности, то из теоремы, сформулированной в работе [6], следует

$$\omega(\delta, r) \rightarrow 0 \text{ при } \delta \rightarrow 0, \quad (3)$$

а из другой теоремы этой работы, что для любого $\delta \in (0, \delta_0]$

$$\Delta_{\delta}^{opt} \leq 2\omega(\delta, r). \quad (4)$$

Таким образом, из (3) и (4) следует, что если $\{T_{\delta} : 0 < \delta \leq \delta_0\} \subset B[F, U]$ и для любого $\delta \in (0, \delta_0]$

$$\Delta_{\delta}(T_{\delta}) = \Delta_{\delta}^{opt},$$

то семейство операторов $\{T_{\delta} : 0 < \delta \leq \delta_0\}$ является линейным методом решения (1) на классе M_r .

Из теоремы, сформулированной в работе [7], следует, что для любого $\delta \in (0, \delta_0]$

$$\Delta_{\delta}^{opt} \geq \omega(\delta, r). \quad (5)$$

2. Оптимальный линейный метод приближенного решения уравнения (1) на классе M_r .

Пусть $U = F = V = H$, A^* и B^* операторы сопряженные A и B соответственно.

Предположим, что спектр $Sp(A_1) = [0, \|A\|^2]$ и $B_1^2 = G \left(A_1^2 \right)^{\frac{1}{2}}$, где $G \in C^1[0, \|A\|]$, для любого $\sigma \in [0, \|A\|]$ $G'(\sigma) > 0$ и $G(0) = 0$; $A_1 = A^*A$, а $B_1 = BB^*$, тогда из леммы, приведенной в [8, с.42] следует, что при $\delta < r\|B\|$ уравнение

$$rG(\sigma)\sigma = \delta \quad (6)$$

имеет единственное решение $\bar{\sigma} = \bar{\sigma}(\delta)$ такое, что

$$\bar{\sigma}(\delta) \rightarrow 0 \text{ при } \delta \rightarrow 0. \quad (7)$$

Из теоремы, доказанной в [9], следует, что при $\delta_0 < r\|B\|$

$$\omega(\delta, r) = rG[\bar{\sigma}(\delta)]; \quad 0 < \delta \leq \delta_0, \quad (8)$$

где $\bar{\sigma}(\delta)$ решение уравнения (6).

Из (7) и (8) следует, что множество $M_r = BS_r$, будет являться классом корректности для уравнения (1).

Предположим, что множества значений $R(A)$ и $R(A^*)$ операторов A и A^* всюду плотны в пространстве H . Тогда из леммы, доказанной в работе [10], следует, что

$$A = Q_1 \bar{A}, \quad (9)$$

где Q_1 – унитарный оператор, а $\bar{A} = A_1^{\frac{1}{2}}$.

Используя формулу (9), уравнение (1) сведем к уравнению

$$\bar{A}u = g, \quad u, g \in H, \quad (10)$$

где $g = Q_1^* f$, а Q_1^* – оператор сопряженный Q_1 .

Так как $B = \bar{B}Q_2$, где Q_2 – унитарный оператор, а $\bar{B} = B_1^{\frac{1}{2}}$, то $M_r = \bar{B}S_r$. Таким образом, в дальнейшем вместо уравнения (1) будем рассматривать уравнение (10), а в качестве представления класса корректности M_r будем использовать формулу

$$M_r = \bar{B}S_r. \quad (11)$$

Пусть $\delta < r\|\bar{B}\|$, $\delta \in (0, \delta_0]$, а $\bar{\sigma}(\delta)$ – решение уравнения (6). Тогда семейство $\{P_\delta : 0 < \delta \leq \delta_0\}$ линейных ограниченных операторов P_δ определим формулой

$$P_\alpha = \bar{B}(\bar{C} + \alpha E)^{-1} \quad (12)$$

где $\bar{C} = \bar{A}\bar{B}$, а параметр $\bar{\alpha} = \bar{\alpha}(\delta)$ определяется формулой

$$\bar{\alpha}(\delta) = \frac{G^2(\bar{\sigma}(\delta))}{G'(\bar{\sigma}(\delta))}, \quad (13)$$

где $\bar{\sigma}(\delta)$ – решение уравнения (6).

В работе [9] доказано, что для любого $\delta < r\|\bar{B}\|$ справедлива оценка

$$\Delta_\delta(P_\delta) \leq rG[\bar{\sigma}(\delta)]. \quad (14)$$

Из оценки (14) следует, что линейный метод $\{P_\delta : 0 < \delta \leq \delta_0\}$, определяемый формулами (12) и (13), оптимален на классе M_r , а в оценке (14) выполняется равенство.

3. Обратная задача тепловой диагностики.

Эта задача может быть поставлена следующим образом, см. [2]

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}; \quad x \in [0,1], t \geq 0, \quad (15)$$

$$u(x,0) = 0; \quad x \in [0,1], \quad (16)$$

$$u(0,t) = 0; \quad t \geq 0, \quad (17)$$

$$u(x_0,t) = f(t); \quad t \geq 0, \quad 0 < x_0 < 1, \quad (18)$$

а граничное значение

$$u(1,t) = u(t) \quad (19)$$

требуется определить.

Так как задача (15)–(19) некорректна, то предположим, что при $f_0(t) \in L_2[0, \infty)$ существует ее точное решение $u_0(t)$, принадлежащее пространству $W_2^n[0, \infty)$, $n \geq 2$ и удовлетворяющее соотношению

$$\int_0^\infty [u_0^{[n]}(t)]^2 dt \leq r^2, \quad (20)$$

где r – известная положительная величина, а $u_0^{[n]}(t)$ – n -я обобщенная производная.

Кроме того, предположим, что $u_0(t) \neq 0$, существует $t_0 > 2$ такое, что при $t \geq t_0$ $u_0(t) = 0$ и $u_0^{[j]}(0) = u_0^{[j]}(t_0) = 0$ при $j \in \overline{0, n-1}$.

Из теоремы, сформулированной в [11, с. 392] следует, что прямая задача (15)–(17), (19) при $u(1,t) = u_0(t)$ имеет классическое решение $u_0(x,t)$, принадлежащее пространству $C^{2,1}[0, \infty)$ и это решение единственно.

Так как функция $u_0(1,t) = 0$ при $t \geq t_0$, то решение $u_0(x,t)$ удовлетворяет следующей вспомогательной задаче

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial^2 u(x,t)}{\partial x^2}; \quad 0 \leq x \leq 1, t \geq t_0, \quad (21)$$

$$u(x, t_0) = u_0(x, t_0); \quad x \in [0, 1], \quad (22)$$

$$u(0, t) = u(1, t) = 0 \quad \text{при } t \geq t_0, \quad (23)$$

и

$$u_0(x, t_0) \in C^2[0, 1]. \quad (24)$$

Используя метод разделения переменных, запишем решение задачи (21)–(24) в виде тригонометрического ряда

$$u(x, t) = \sum_{k=1}^{\infty} a_k e^{-(\pi k)^2(t-t_0)} \sin \pi k x; \quad x \in [0, 1], t \geq t_0, \quad (25)$$

где

$$a_k = 2 \int_0^1 u_0(x, t_0) \sin \pi k x dx. \quad (26)$$

Из (25) следует, что

$$u'_t(x, t) = -\sum_{k=1}^{\infty} (\pi k)^2 a_k e^{-(\pi k)^2(t-t_0)} \sin \pi k x; \quad x \in [0, 1], t \geq t_0, \quad (27)$$

$$u'_x(x, t) = \sum_{k=1}^{\infty} \pi k a_k e^{-(\pi k)^2(t-t_0)} \cos \pi k x; \quad x \in [0, 1], t \geq t_0, \quad (28)$$

$$u''_{xx}(x, t) = -\sum_{k=1}^{\infty} (\pi k)^2 a_k e^{-(\pi k)^2(t-t_0)} \sin \pi k x; \quad x \in [0, 1], t \geq t_0, \quad (29)$$

Исследуем поведение функции $u(x, t)$, $u'_x(x, t)$, $u''_{xx}(x, t)$ и $u'_t(x, t)$, определенных формулами (25)–(29) при $t \rightarrow \infty$. Для этого оценим общий член в сумме (29)

$$\left| (\pi k)^2 a_k e^{-(\pi k)^2(t-t_0)} \sin \pi k x \right| \leq (\pi k)^2 e^{-(\pi k)^2} |a_k| e^{-(\pi k)^2(t-t_0-1)}. \quad (30)$$

Так как из леммы, сформулированной в [14, с. 140] следует, что

$$\sup_{\lambda > 0} \frac{\lambda^p}{e^\lambda} \leq \left(\frac{p}{e} \right)^p, \quad p > 0,$$

то из (30) следует, что

$$\left| (\pi k)^2 a_k e^{-(\pi k)^2(t-t_0)} \sin \pi k x \right| \leq \frac{1}{(\pi k)^2} |a_k| e^{-(t-t_0-1)}. \quad (31)$$

Учитывая (24), (31) и то, что $(\pi k)^{-2} |a_k| \leq (\pi k)^{-4} + a_k$, а соответствующие ряды $\sum_{k=1}^{\infty} (\pi k)^{-4}$ и $\sum_{k=1}^{\infty} a_k^2$ сходятся, получаем существование числа l_1 такого, что для любого $t \geq t_0$ справедлива оценка

$$\max \left\{ |u(x, t)|, |u'_x(x, t)|, |u''_{xx}(x, t)|, |u'_t(x, t)| \right\} \leq l_1 e^{-t}, \quad (32)$$

равномерная по x на отрезке $[0, 1]$.

Из теоремы, сформулированной в [13, с. 17], и оценки (32) следует, что для решения задачи (15)–(19) можно применить синус и косинус преобразования.

Теперь предположим, что вместо точного значения $f_0(t)$ известно некоторое приближение $f_\delta(t) \in C^1[0, \infty) \cap L_2[0, \infty)$ и число $\delta > 0$ такие, что

$$\int_0^{\infty} [f_\delta(t) - f_0(t)]^2 dt \leq \delta^2. \quad (33)$$

Требуется по (f_δ, δ, r) определить приближенное решение $u_\delta(t)$ задачи (15)–(19) наиболее близкое к $u_0(t)$ в метрике $L_2[0, \infty)$.

Пусть \bar{H} – ортогональная сумма пространств $L_2[0, \infty)$ и $iL_2[0, \infty)$, где $i = \sqrt{-1}$, а Φ – преобразование пространства \bar{H} в \bar{H} , определяемое формулой

$$\Phi[u + iv] = \frac{1}{\sqrt{e}}(F_c(u) - iF_s(v)), \quad (34)$$

где F_c и F_s – соответствующие косинус и синус Фурье преобразования.

Из теоремы Планшереля, сформулированной в [13, с. 19] будет следовать, что преобразование Φ , определяемое формулой (34), будет изометрично отображать пространство \bar{H} на \bar{H} .

4. Сведение уравнения (15) к обыкновенному дифференциальному уравнению.

Рассмотрим уравнение

$$i \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = i \frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2}; \quad x \in [0, 1], \quad t \geq 0. \quad (35)$$

Затем, применяя к уравнениям (15) и (35) синус и косинус преобразования, почленно складывая результаты этих преобразований и нормируя сумму, получаем уравнение

$$\frac{d^2}{dx^2} \hat{u}(x, \lambda) = i \hat{u}(x, \lambda); \quad x \in [0, 1], \quad \lambda \geq 0, \quad (36)$$

где $\hat{u}(x, \lambda) = \Phi[u + iu]$.

Из (17)–(18) будет следовать,

$$\hat{u}(0, \lambda) = 0; \quad \lambda \geq 0, \quad (37)$$

и

$$\hat{u}(x_0, \lambda) = \hat{f}(\lambda), \quad \lambda \geq 0, \quad (38)$$

где $\hat{f}(\lambda) = \Phi[f(t) + if(t)]$.

Решая задачу (36)–(38), получаем, что

$$\hat{u}(\lambda) = 2i \frac{\text{sh } \mu_0 \sqrt{\lambda}}{\text{sh } \mu_0 x_0 \sqrt{\lambda}} \hat{f}(\lambda), \quad \lambda \geq 0, \quad (39)$$

где $\hat{u}(\lambda) = \hat{u}(1, \lambda)$, а $\mu_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + i)$.

Переписав (39) в виде операторного уравнения, получаем, что

$$A \hat{u}(\lambda) = -\frac{i \text{sh } \mu_0 x_0 \sqrt{\lambda}}{2 \text{sh } \mu_0 \sqrt{\lambda}} \hat{u}(\lambda) = \hat{f}(\lambda), \quad \lambda \geq 0. \quad (40)$$

Не меняя обозначений, продолжим оператор A , определяемый формулой (40), на все пространство \bar{H} . Тогда из (40) будет следовать, что операторы A и его сопряженный A^* являются инъективными линейными ограниченными операторами, отображающими пространство \bar{H} в \bar{H} . Таким образом, из леммы, сформулированной в [10], следует существование унитарного оператора Q , отображающего \bar{H} в \bar{H} , такого, что для любого $\hat{u} \in \bar{H}$

$$A \hat{u}(\lambda) = Q \bar{A} \hat{u}(\lambda),$$

где $\bar{A} = \sqrt{A^* A}$.

Из (40) следует, что для любого $\hat{u} \in \bar{H}$

$$\bar{A} \hat{u}(\lambda) = \frac{1}{2} \frac{|\text{sh } \mu_0 x_0 \sqrt{\lambda}|}{|\text{sh } \mu_0 \sqrt{\lambda}|} \hat{u}(\lambda), \quad (41)$$

а уравнение (40) может быть переписано в виде

$$\bar{A} \hat{u}(\lambda) = \hat{g}(\lambda), \quad (42)$$

где $\hat{g}(\lambda) = Q^* \hat{f}(\lambda)$, Q^* – унитарный оператор, сопряженный Q , а $\lambda \geq 1$.

Пусть \bar{H}_1 подпространство функций $\hat{u}(\lambda)$ из \bar{H} , обращающихся в нуль на отрезке $[0, 1]$, а оператор \bar{B} , определяющий класс корректности M_r для уравнения (42) отображает пространство \bar{H}_1 в \bar{H}_1 и на основании (20) определяется формулой

$$\bar{B}\hat{v}(\lambda) = \frac{1}{\lambda^n} \hat{v}(\lambda); \lambda \geq 1, \hat{v} \text{ и } \bar{B}\hat{v} \in \bar{H}_1. \quad (43)$$

Из (41) и (43) следует, что $\bar{B} = G(\bar{A})$, где функция $G(\sigma)$ задана параметрически, она непрерывно дифференцируема, для любого $\sigma \in (0, \|\bar{A}\|)$, $G'(\sigma) > 0$ и $G(0) = 0$.

Теперь для уравнения (42) поставим условно-корректную задачу, т. е. предположим, что при $\hat{g}_0 = Q^* \hat{f}_0$ уравнение (42) имеет решение $\hat{u}_0(\lambda)$, принадлежащее классу корректности \hat{M}_r , определяемому формулой

$$\hat{M}_r = \{ \bar{B}\hat{v}(\lambda) : \hat{v}(\lambda) \in \bar{H}_1, \|\hat{v}\| \leq r \}, \quad (44)$$

где оператор \bar{B} определён формулой (43).

Далее предположим, что вместо $\hat{g}_0(\lambda)$ нам известны $\delta > 0$ и $\hat{g}_\delta(\lambda) = Q^* \hat{f}_\delta(\lambda)$ такие, что

$$\|\hat{g}_0 - \hat{g}_\delta\| \leq \delta.$$

5. Оптимальный метод регуляризации.

Для приближенного решения уравнения (42) используем оптимальный метод $\{P_\delta : 0 < \delta \leq \delta_0\}$, предложенный в пункте 2 настоящей статьи.

Используя этот метод, приближенное решение $\hat{u}_\delta(\lambda)$ определим формулой

$$\hat{u}_\delta(\lambda) = \bar{B}(\bar{C} + \bar{\alpha}(\delta))^{-1} \hat{g}_\delta(\lambda), \quad (45)$$

где $\bar{C} = \bar{A}\bar{B}$, а $\bar{\alpha}(\delta)$ определяется формулой

$$\bar{\alpha}(\delta) = \frac{G^2(\bar{\sigma}(\delta))}{G'(\bar{\sigma}(\delta))}, \quad (46)$$

$\bar{\sigma}(\delta)$ – решение уравнения $rG(\sigma)\sigma = \delta$.

Тогда для приближенного решения $\hat{u}_\delta(\lambda)$ уравнения (42) справедлива оценка

$$\|\hat{u}_\delta - \hat{u}_0\| \leq rG[\bar{\sigma}(\delta)]. \quad (47)$$

Теперь функцию $\tilde{u}_\delta(\lambda)$ определим формулой

$$\tilde{u}_\delta(\lambda) = \begin{cases} \hat{u}_\delta(\lambda) & \text{при } \lambda \geq 1 \\ 2i \frac{\text{sh} \mu_0 \sqrt{\lambda}}{\text{sh} \mu_0 x_0 \sqrt{\lambda}} \hat{f}_\delta(\lambda) & \text{при } \lambda \in [0, 1) \end{cases}.$$

Окончательно приближенное решение $u_\delta(t)$ задачи (24)–(28) определим формулой

$$u_\delta(t) = \text{Re}[\Phi^{-1}(\tilde{u}_\delta)],$$

где Φ^{-1} – отображение обратное к Φ , определенному формулой (34).

Для приближенного решения $u_\delta(t)$ будет справедлива оценка

$$\|u_\delta - u_0\| \leq rG[\bar{\sigma}(\delta)] + \delta.$$

Имеет место следующее соотношение

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{rG[\bar{\sigma}(\delta)] + \delta}{r2^{-n}(1-x_0)^{2n} \ln^{-2n}\left(\frac{r}{2\delta}\right)} = 1,$$

которое позволяет судить о скорости сходимости оптимального приближенного решения к точному.

Литература

1. Алифанов, О.М. Обратные задачи теплообмена / О.М. Алифанов. – М.: Машиностроение, 1988 – 279 с.
2. Танана, В.П. Об оптимальности по порядку метода проекционной регуляризации при решении обратных задач / В.П. Танана // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2004. – Т. 7, № 2. – С. 117–132.
3. Лаврентьев, М.М. О некорректных задачах математической физики / М.М. Лаврентьев. – Новосибирск: СО АН СССР, 1962 – с. 92.
4. Танана, В.П. Об оптимальности по порядку метода проекционной регуляризации при решении условно-корректных задач / В.П. Танана // Доклады РАН. – 2006. – Т. 410, № 6. – С. 1–3.
5. Иванов, В.К. Об оценки погрешности при решении некорректных задач / В.К. Иванов, Т.И. Королюк // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1969. – Т.9, № 1. – С. 30–42.
6. Танана, В.П. Об оптимальном по порядку методе решения условно-корректных задач / В.П. Танана, Н.М. Япарова // Сибирский журнал вычислительной математики. – 2006. – Т. 9, № 4. – С. 353–368.
7. Танана, В.П. О классификации некорректно поставленных задач и оптимальных методах их решения / В.П. Танана // Изв. вузов. Математика. – 1977. – № 11. – С. 106–112.
8. Танана, В.П. Методы решения операторных уравнений / В.П. Танана. – М.: Наука, 1981. – С. 160.
9. Танана, В.П. Об оптимальных методах решения линейных уравнений первого рода с приближенно заданным оператором / В.П. Танана, Я.М. Севастьянов // Сибирский журнал вычислительной математики. – 2003. – Т.6, № 2. – С. 205–208.
10. Менихес, Л.Д. Конечномерная аппроксимация в методе М.М. Лаврентьева / Л.Д. Менихес, В.П. Танана // Сибирский журнал вычислительной математики. – 1998. – Т.1, № 1. – С. 416–423.
11. Михайлов, В.П. Дифференциальные уравнения в частных производных / В.П. Михайлов. – М: Наука, 1976. – 391 с.
12. Танана, В.П. Оптимизация методов решения операторных уравнений / В.П. Танана, А.П. Рекант, С.И. Янченко. – Свердловск: Издательство Уральского университета, 1987. – 200 с.
13. Диткин, В.А. Интегральные преобразования и операторное исчисление / В.А. Диткин, А.П. Прудников. – М: Наука, 1961. – 524 с.

Поступила в редакцию 19 июня 2007 г.

ИГРОВАЯ ЗАДАЧА ИМПУЛЬСНОЙ ВСТРЕЧИ СО СМЕШАННЫМ ОГРАНИЧЕНИЕМ НА УПРАВЛЕНИЕ ВТОРОГО ИГРОКА

В.И. Ухоботов, О.В. Зайцева

Рассмотрена игровая задача о встрече в заданный момент времени. На выбор управления первого игрока накладывается импульсное ограничение. Управление второго игрока стеснено геометрическими и интегральными ограничениями. Найдены как условия уклонения, так и условия, обеспечивающие встречу. Построены соответствующие управления игроков.

1. ВВЕДЕНИЕ

Рассматривается линейная дифференциальная игра

$$dx = A(t)x dt + B(t)du + C(t)v dt \quad (1)$$

с импульсным управлением [1] первого игрока u и с фиксированным моментом окончания p . Здесь $x \in R^s$, $u \in R^s$, $v \in R^q$, $A(t)$, $B(t)$, $C(t)$ – непрерывные при $t \leq p$ матрицы соответствующих размерностей. Задано линейное отображение $\pi: R^s \rightarrow R^n$. Цель первого игрока заключается в том, чтобы в момент времени p осуществить равенство

$$\pi x(p) = 0. \quad (2)$$

Второй игрок, выбирая управление v , стремится не допустить выполнение равенства (2).

На каждом отрезке $[t, \tau]$ допустимым программным управлением первого игрока является функция $u: [t, \tau] \rightarrow R^s$ с ограниченной вариацией $\int_t^\tau \|du(r)\| = \sup \sum \|u(r_{i+1}) - u(r_i)\|$. Допустимое программное управление второго игрока является измеримым и ограниченным

$$\lambda(v(r)) \leq 1, \quad t \leq r \leq \tau. \quad (3)$$

Здесь посредством $\|\cdot\|$ и $\lambda(\cdot)$ обозначены нормы в R^s и R^q соответственно.

Считается, что игроки обладают запасами $\mu \geq 0$ и $\gamma \geq 0$ ресурсов, которые тратятся на формирование управлений по следующему правилу:

$$\mu(\tau) = \mu(t) - \int_t^\tau \|du(r)\|, \quad \gamma(\tau) = \gamma(t) - \int_t^\tau \lambda(v(r)) dr. \quad (4)$$

При выбранных программных управлениях вектор x из состояния $x(t)$ перемещается в состояние, определяемое обобщенной формулой Коши [1].

Обозначим через $\Phi(t)$ фундаментальную матрицу системы (1) и перейдем к новой переменной

$$z(t) = \pi(t)x(t), \quad \pi(t) = \pi \Phi(p)\Phi^{-1}(t). \quad (5)$$

Тогда получим, что

$$z(\tau) = z(t) + \int_t^\tau N(r)du(r) + \int_t^\tau M(r)v(r)dr. \quad (6)$$

Здесь $N(t) = \pi(t)B(t)$, $M(t) = \pi(t)C(t)$ – непрерывные матрицы, а первый интеграл понимается в смысле Римана–Стилтьеса.

В новых переменных условие встречи (2) принимает вид

$$z(p) = 0. \quad (7)$$

В 1963 году Н.Н. Красовский [2] предложил метод решения дифференциальных игр, основанный на принципе поглощения областей достижимости. В этой работе рассмотрены игры с геометрическими, интегральными и импульсными ограничениями. Применение метода поглощения областей достижимости для игр с импульсными управлениями усложняется тем, что области достижимости, зависящие от запасов ресурсов, могут меняться разрывно. В работе [3] приведен

пример импульсной встречи двух точек, в котором первый игрок не сможет поддержать требуемого в методе включения областей достижимости.

В данной работе используется метод одномерного проектирования [4–6], который применительно к задачам импульсной встречи позволяет получить условие возможности поимки (7).

Наличие импульсного управления, приводящего к мгновенному изменению позиции, требует конкретизации понятия встречи (7).

Введем в рассмотрение вектограмму первого игрока

$$U(t) = \{z \in R^n : z = N(t)u, \|u\| \leq 1\}. \quad (8)$$

Считаем, что встреча произошла, если

$$z(p) \in \mu(p)U(p). \quad (9)$$

Если выполнено это включение, то первый игрок путем мгновенного выбора части оставшегося запаса ресурсов может осуществить равенство (7).

2. ЗАДАЧА УКЛОНЕНИЯ

Обозначим через $\langle \cdot, \cdot \rangle$ скалярное произведение векторов в R^n . При каждом $t \leq p$ и $\varphi \in R^n$ обозначим

$$\alpha_1(t, \varphi) = \max_{\|u\|=1} \langle \varphi, N(t)u \rangle, \quad \alpha_2(t, \varphi) = \max_{\|v\|=1} \langle \varphi, M(t)v \rangle. \quad (10)$$

Функция $\alpha_1(t, \varphi)$ является опорной функцией вектограммы (8), а функция $\alpha_2(t, \varphi)$ является опорной функцией вектограммы второго игрока $V(t) = \{z \in R^n : z = M(t)v, \|v\| = 1\}$. Из непрерывности матриц $N(t)$ и $M(t)$ следует непрерывность функций (10) [7].

Положим

$$m(t, \varphi) = \max_{t \leq r \leq p} \alpha_1(r, \varphi). \quad (11)$$

Верна оценка [1]

$$\left| \int_t^\tau \langle \varphi, N(r)du(r) \rangle \right| \leq m(t, \varphi) \int_t^\tau \|du(r)\|. \quad (12)$$

Функция (11) является опорной функцией области достижимости U_t^τ первого игрока [5, 6], где

$$U_t^\tau = \left\{ z \in R^n : z = \int_t^\tau N(r)du(r), \int_t^\tau \|du(r)\| = 1 \right\}. \quad (13)$$

Предположение 1. При любых $t < p, \varphi \neq 0$ выполнено неравенство $m(t, \varphi) > 0$.

Обозначим при $t < p, \gamma \geq 0$

$$F(t, \gamma, \varphi) = \sup \int_t^p \frac{\alpha_2(r, \varphi)}{m(r, \varphi)} w(r) dr, \quad \int_t^p w(r) dr \leq \gamma, \quad 0 \leq w(r) \leq 1. \quad (14)$$

Отметим, что в случае $m(p, \varphi) = 0$ целевой интеграл в (14) понимается как несобственный.

Теорема 1. Пусть начальное состояние $t_0, z_0, \mu_0, \gamma_0$ таково, что существует вектор $\varphi \in R^n$, для которого

$$|\langle \varphi, z_0 \rangle| > m(t_0, \varphi)(\mu_0 - F(t_0, \gamma_0, \varphi)). \quad (15)$$

Тогда возможно уклонение от встречи (9).

Доказательство. Из (14) и (15) следует, что существует функция $w(r)$, удовлетворяющая ограничениям (14) с $\gamma = \gamma_0, t = t_0$ такая, что

$$|\langle \varphi, z_0 \rangle| > m(t_0, \varphi) \left(\mu_0 - \int_{t_0}^p \frac{\alpha_2(r, \varphi)}{m(r, \varphi)} w(r) dr \right). \quad (16)$$

Возьмем набор точек

$$t_0 < t_1 < \dots < t_k = p \quad (17)$$

и обозначим

$$A_i = \sum_{j=i}^{k-1} \frac{1}{m(t_j, \varphi)} \int_{t_j}^{t_{j+1}} \alpha_2(r, \varphi) w(r) dr, \quad i = 0, 1, \dots, k-1. \quad (18)$$

Тогда [5] верхняя грань числа A_0 по всем наборам (17) равняется интегралу, стоящему в правой части формулы (16). Следовательно, при некотором наборе чисел (17) выполняется

$$|\langle \varphi, z_0 \rangle| > m(t_0, \varphi)(\mu_0 - A_0). \quad (19)$$

Из определения функции α_2 (10), применяя лемму о выборе А.Ф. Филиппова [8], найдем измеримую по t функцию $v(t, \varphi) \in R^q$ такую, что

$$\lambda(v(t, \varphi)) = 1, \quad \langle \varphi, M(t)v(t, \varphi) \rangle = \alpha_2(t, \varphi). \quad (20)$$

Второй игрок строит свою стратегию следующим образом: берет найденные моменты времени t_i (17) в качестве моментов коррекций и при $t_i \leq t \leq t_{i+1}$ строит управление с помощью функции (20)

$$v_i(t) = w(t)v(t, \varphi) \text{sign} \langle \varphi, z(t_i) \rangle. \quad (21)$$

Здесь принято, что $\text{sign} 0 = 1$. Покажем, что при любом допустимом поведении первого игрока реализовавшиеся в моменты времени t_i положения $z_i = z(t_i)$ и запасы $\mu_i = \mu(t_i)$ удовлетворяют неравенствам

$$|\langle \varphi, z_i \rangle| > m(t_i, \varphi)(\mu_i - A_i). \quad (22)$$

При $i = 0$ это неравенство выполнено. Пусть оно выполнено в момент времени t_i . Тогда из правила перехода (6) и из формул (20) и (21) получим, что

$$|\langle \varphi, z_{i+1} \rangle| \geq \left| \langle \varphi, z_i \rangle + \text{sign} \langle \varphi, z_i \rangle \int_{t_i}^{t_{i+1}} w(r) \alpha_2(r, \varphi) dr - \left| \int_{t_i}^{t_{i+1}} \langle \varphi, N(r) du(r) \rangle \right| \right|.$$

Отсюда, используя неравенства (12), (22) и правило изменения ресурсов (4), получим, что

$$|\langle \varphi, z_{i+1} \rangle| > m(t_i, \varphi)(\mu_i - A_i) + \int_{t_i}^{t_{i+1}} w(r) \alpha_2(r, \varphi) dr - m(t_i, \varphi)(\mu_i - \mu_{i+1}).$$

Подставим сюда формулу (18). Получим, что

$$|\langle \varphi, z_{i+1} \rangle| > m(t_i, \varphi)(\mu_{i+1} - A_{i+1}).$$

Отсюда и из условия монотонности $m(t_i, \varphi) \geq m(t_{i+1}, \varphi)$ следует неравенство (22) при $i + 1$, если $\mu_{i+1} \geq A_{i+1}$. Если же $\mu_{i+1} < A_{i+1}$, то неравенство (22) при $i + 1$ очевидно.

Полагая в неравенстве (22) $i = k$, получим, что

$$|\langle \varphi, z(p) \rangle| > m(p, \varphi)\mu(p) = \alpha_1(p, \varphi)\mu(p).$$

Следовательно, включение (9) не выполнено.

Следствие 1. Для того чтобы первый игрок смог осуществить встречу (9), необходимо, чтобы начальные запасы ресурсов удовлетворяли неравенству

$$\mu_0 \geq \sup_{\varphi} F(t_0, \gamma_0, \varphi), \quad \langle \varphi, \varphi \rangle = 1. \quad (23)$$

3. ЗАДАЧА О ВСТРЕЧЕ

Обозначим

$$\alpha(t) = \max_{\varphi} \frac{\alpha_2(t, \varphi)}{m(t, \varphi)}, \quad \langle \varphi, \varphi \rangle = 1. \quad (24)$$

Как максимум непрерывных функций эта функция непрерывна при $t < p$ [7].

Предположение 2. При любом $t < p$ интеграл $\int_t^p \alpha(r) dr < \infty$.

При любых $t < \tau \leq p, \gamma \geq 0, \varphi \in R^n$ обозначим

$$\beta(t, \tau, \gamma) = \sup \int_t^\tau \alpha(r) w(r) dr, \quad (25)$$

$$\beta(t, \tau, \gamma, \varphi) = \sup \int_t^\tau \alpha_2(r, \varphi) w(r) dr. \quad (26)$$

Здесь \sup берется по всем измеримым функциям $w: [t, \tau] \rightarrow [0, 1]$, удовлетворяющим неравенству

$$\int_t^\tau w(r) dr \leq \gamma. \quad (27)$$

Из определения функции (25) следует, что

$$\beta(t, p, \gamma) \geq \beta(t, \tau, \gamma_*) + \beta(\tau, p, \gamma - \gamma_*), \quad t < \tau \leq p, \quad 0 \leq \gamma_* \leq \gamma. \quad (28)$$

Из монотонности функции $m(t, \varphi)$ и из формул (24) – (27) получим неравенство

$$\beta(t, \tau, \gamma, \varphi) \leq m(t, \varphi) \beta(t, \tau, \gamma). \quad (29)$$

Из этого неравенства и из формулы (25) следует, что

$$\frac{\beta(t, \tau, \gamma, \varphi)}{m(\tau, \varphi)} \leq \beta(t, \tau, \gamma) + \frac{m(t, \varphi) - m(\tau, \varphi)}{m(\tau, \varphi)} \int_t^\tau \alpha(r) dr. \quad (30)$$

Теорема 2. Пусть начальное состояние таково, что

$$|\langle \varphi, z_0 \rangle| < m(t_0, \varphi)(\mu_0 - \beta(t_0, p, \gamma_0)), \quad \forall \varphi \in R^n. \quad (31)$$

Тогда первый игрок сможет осуществить встречу (9).

Доказательство. Обозначим

$$B(t, z) = \max_\varphi \frac{|\langle \varphi, z \rangle|}{m(t, \varphi)}, \quad \langle \varphi, \varphi \rangle = 1. \quad (32)$$

Тогда из (31) следует, что существует число $\varepsilon > 0$ такое, что

$$B(t_0, z_0) + \beta(t_0, p, \gamma_0) + \varepsilon(p - t_0) \leq \mu_0. \quad (33)$$

Используя непрерывность функций $m(t, \varphi)$ и $\alpha(t)$ можно показать, что для любого отрезка $T \subset (-\infty, p)$ существует число $\delta > 0$ такое, что для любого вектора $\varphi \in R^n$ выполнено

$$\frac{m(t, \varphi) - m(\tau, \varphi)}{m(\tau, \varphi)} \int_t^\tau \alpha(r) dr \leq \varepsilon(\tau - t); \quad t, \tau \in T, \quad t < \tau \leq t + \delta. \quad (34)$$

Отсюда следует, что можно построить последовательность чисел $t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_i \rightarrow p$, для которых выполнено неравенство (34) при $t = t_i, \tau = t_{i+1}$. Учитывая неравенство (30), получим, что при любых $\gamma \geq 0, \varphi \in R^n$ выполнено

$$\frac{\beta(t_i, t_{i+1}, \gamma, \varphi)}{m(t_{i+1}, \varphi)} \leq \beta(t_i, t_{i+1}, \gamma) + \varepsilon(t_{i+1} - t_i). \quad (35)$$

Эти числа t_i первый игрок берет в качестве моментов коррекции своего управления. Построим на отрезке $[t_i, t_{i+1}]$ управление первого игрока.

Пусть в момент времени t_i реализовавшееся состояние удовлетворяет неравенству

$$B(t_i, z_i) + \beta(t_i, p, \gamma_i) + \varepsilon(p - t_i) \leq \mu_i. \quad (36)$$

Тогда, используя обозначение (32), получим, что проблема моментов [1]

$$\int_{t_i}^p \|du(r)\| \rightarrow \min, \quad z_i + \int_{t_i}^p N(r) du(r) = 0$$

имеет решение $u_i(r)$, причем

$$\int_{t_i}^p \|du_i(r)\| \leq \mu_i - \beta(t_i, p, \gamma_i) - \varepsilon(p - t_i). \quad (37)$$

Первый игрок в качестве управления берет сужение функции $u_i(r)$ на отрезке $[t_i, t_{i+1}]$. Тогда из правила перехода (6) получим, что для любого вектора $\varphi \in R^n$ выполнено неравенство

$$\begin{aligned} |\langle \varphi, z_{i+1} \rangle| &\leq \left| \left\langle \varphi, z_i + \int_{t_i}^{t_{i+1}} N(r) du_i(r) \right\rangle \right| + \left| \left\langle \varphi, \int_{t_i}^{t_{i+1}} M(r) v(r) dr \right\rangle \right| \leq \\ &\leq \left| \left\langle \varphi, - \int_{t_{i+1}}^p N(r) du_i(r) \right\rangle \right| + \int_{t_i}^{t_{i+1}} \alpha_2(r, \varphi) \lambda(v(r)) dr \leq m(t_{i+1}, \varphi) \int_{t_{i+1}}^p \|du_i(r)\| + \beta(t_i, t_{i+1}, \gamma_i - \gamma_{i+1}, \varphi). \end{aligned}$$

Отсюда, используя неравенства (35) и (37), будем иметь

$$|\langle \varphi, z_{i+1} \rangle| \leq m(t_{i+1}, \varphi) (\mu_{i+1} - \beta(t_i, p, \gamma_i) - \varepsilon(p - t_i)) + \beta(t_i, t_{i+1}, \gamma_i - \gamma_{i+1}) + \varepsilon(t_{i+1} - t_i).$$

Применив неравенство (28), получим неравенство (36) при $i + 1$. Переходя в неравенстве (36) к пределу при $t_i \rightarrow p$, получим, что $|\langle \varphi, z(p) \rangle| \leq \alpha_1(p, \varphi) \mu(p)$ для любого вектора $\varphi \in R^n$. Стало быть, условие поимки (9) выполнено.

4. ОДНОТИПНЫЕ ИГРЫ

Пусть $m(t, \varphi) = m(t)c(\varphi)$, $\alpha_2(t, \varphi) = \beta(t)c(\varphi)$. Тогда функции (14) и (25) будут равны и примут вид

$$F(t, \gamma) = \sup \int_t^p \frac{\beta(r)}{m(r)} w(r) dr, \quad \int_t^p w(r) dr \leq \gamma, \quad 0 \leq w(r) \leq 1. \quad (38)$$

Обозначим $c_*(z) = \max \langle \varphi, z \rangle$, $c(\varphi) = 1$. Тогда условия (15) и (31) примут вид

$$c_*(z_0) > m(t_0)(\mu_0 - F(t_0, \gamma_0)), \quad c_*(z_0) < m(t_0)(\mu_0 - F(t_0, \gamma_0)).$$

Можно показать, что если в последнем неравенстве поставить знак равенства, то первый игрок сможет осуществить встречу (9).

Таким образом, найденное условие является необходимым и достаточным для осуществления встречи (9).

Пример. Рассмотрим игровую задачу о встрече в заданный момент времени p двух точек переменного состава с разнотипными законами выброса топлива [1, 5]

$$\dot{x}_1 = y_1, \quad dy_1 = du; \quad \dot{x}_2 = y_2, \quad \dot{y}_2 = -v; \quad x_i, y_i \in R^n.$$

Условие встречи означает совпадение геометрических координат $x_1(p) = x_2(p)$. Сделаем замену (5) и перейдем к новой переменной $z = x_1 - x_2 + (p - t)(y_1 - y_2)$. Тогда уравнение движения (6) и условие встречи (7) принимают вид

$$z(\tau) = z(t) + \int_t^\tau (p - r) du(r) + \int_t^\tau (p - r) v(r) dr, \quad z(p) = 0.$$

Считаем, что нормы $\|\cdot\|$ и $\lambda(\cdot)$ совпадают и являются евклидовыми. Тогда из формул (10) и (11) получим, что $m(t, \varphi) = (p - t)\|\varphi\|$, $\alpha_2(t, \varphi) = (p - t)\|\varphi\|$. Поэтому функция (38) равна $\min(\gamma; p - t)$. Условие возможной поимки примет вид

$$\|z_0\| \leq (\mu_0 - \min(\gamma; p - t_0))(p - t_0).$$

Литература

1. Красовский, Н.Н. Теория управления движением / Н.Н. Красовский. – М.: Наука, 1970. – 420 с.
2. Красовский, Н.Н. Об одной задаче преследования / Н.Н. Красовский // Прикл. мат. и мех. – 1963. – Т. 27. – Вып. 2. – С. 244–254.
3. Красовский, Н.Н. К задаче о преследовании в случае ограничений на импульсы управляющих сил / Н.Н. Красовский, В.Е. Третьяков // Дифференц. уравнения. – 1966. – Т.2, № 5. – С. 587–599.
4. Ухоботов, В.И. Метод одномерного проектирования в линейной игре с интегральным ограничением и однотипные игры / В.И. Ухоботов // Изв. АН. Техн. кибернетика. – 1994. – № 3. – С. 192–199.
5. Ухоботов, В.И. Метод одномерного проектирования в линейных дифференциальных играх с интегральными ограничениями: учеб. пособие / В.И. Ухоботов. – Челябинск: Челяб. гос. ун-т, 2005. – 124 с.
6. Ухоботов, В.И. Гарантированный стабильный мост в линейной игре импульсной встречи с ограничением на энергетику / В.И. Ухоботов // Рукопись деп. в ВИНТИ № 3254 – В 87. – Челябинск: Челяб. гос. ун-т. – 1987. – 20 с.
7. Пшеничный, Б.Н. Выпуклый анализ и экстремальные задачи / Б.Н. Пшеничный. – М.: Наука, 1980. – 320 с.
8. Филиппов, А.Ф. О некоторых вопросах теории оптимального регулирования / А.Ф. Филиппов // Вестник МГУ. Серия «Математика, механика». – 1959. – № 2. – С. 25–32.
9. Красовский, Н.Н. Позиционные дифференциальные игры / Н.Н. Красовский, А.И. Субботин. – М.: Наука, 1974. – 456 с.

Поступила в редакцию 9 июня 2007 г.

ПРЯМОЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ВЕЙВЛЕТ-РАЗЛОЖЕНИЯ

О.В. Филиппов

Рассматривается прямой метод решения СЛАУ, в основе которого лежит нестандартное представление в вейвлет-базисе матрицы системы. Дается краткое введение в вейвлеты и описывается нестандартное представление оператора в вейвлет-базисе. Обсуждается, почему прямой метод при использовании вейвлетов становится эффективным, даже когда рассматриваются плотнозаполненные матрицы.

Введение

Существует много доступных методов решения больших сильно разреженных систем (СРС) линейных уравнений. Наиболее популярными методами решения для таких систем являются итерационные методы.

Прямые методы решения СРС могут также использоваться для решения таких систем. Их эффективность зависит от числа дополнительных ненулевых членов, полученных в ходе LU-факторизации матрицы системы. Напомним, что некоторые разреженные системы не имеют разреженных LU-факторов. В работе [2] предложен метод построения разреженного представления матриц, которые изначально плотно-заполнены.

Далее будет показано, что, если использовать нестандартное представление в вейвлет-базисе матрицы системы, соответствующие LU-факторы будут также сильно разреженными, это делает эффективным прямой метод решения СЛАУ.

Перечислим основные определения и свойства вейвлетов.

Вейвлет-функция ψ строится по масштабирующей функции φ , которая обладает двумя свойствами:

а) система функций $\{\varphi(x-k), k \in Z\}$ ортогональна в $L^2(R)$,

б) функция является решением функционального уравнения

$$\varphi(x) = \sqrt{2} \sum_k h_k \varphi(2x-k). \quad (1)$$

Тогда для вейвлет-функции ψ верно представление

$$\psi(x) = \sqrt{2} \sum_k (-1)^k h_{1-k} \varphi(2x-k). \quad (2)$$

Наибольший интерес представляют компактно-сосредоточенные функции φ и ψ . В этом случае фильтр h_k конечен.

Пусть $V_0 = \text{span}\{\varphi(x-k), k \in Z\} = \{f \in L^2(R), f(x) = \sum c_k \varphi(x-k), \sum c_k \leq \infty\}$ и

$\varphi_{j,k}(x) = 2^{j/2} \varphi(2^j x - k)$. Через V_j обозначим линейную оболочку $\text{span}\{2^{j/2} \varphi(2^i - k), k \in Z\}$.

Из соотношения (1) следует, что

$$\dots \subset V_{-1} \subset V_0 \subset V_1 \subset \dots$$

Определим подпространство W_j как ортогональное дополнение V_j в V_{j+1} , т.е.

$V_{j+1} = V_j \oplus W_j$. Если $\bigcup_j V_j = L^2(R)$ и $\bigcap_j V_j = \{0\}$, то доказывается в [1], что

$$L^2(R) = V_0 \oplus_{j \geq 0} W_j.$$

Система функций $\{\psi_{j,k}(x)\}_{j \geq 0}$ и $\{\varphi_{0,k}(x)\}$ является ортогональным базисом в пространстве $L^2(R)$. В частности, $V_n = V_0 \oplus_{0 \leq j \leq n-1} W_j$.

Тогда система функций $\{\psi_{j,k}^{nep}(x)\}_{j \geq 0}$ и $\{\varphi_{0,k}^{nep}(x)\}$, где

$$\psi_{j,k}^{nep}(x) = \sum_l \psi_{j,k}(x+l) \text{ и } \varphi_{0,k}^{nep}(x) = \sum_l \varphi_{0,k}(x+l),$$

является ортогональным базисом в $L^2(0,1)$. Определим проектор P_j на подпространство $V_j, j \in Z$,

$$P_j : L^2(R) \rightarrow V_j,$$

и Q_j на подпространстве W_j

$$Q_j : L^2(R) \rightarrow W_j,$$

где $Q_j = P_{j-1} - P_j$. Для линейного оператора $T : L^2(0,1) \rightarrow L^2(0,1)$ оператор $T_j = P_j T P_j$ будет называться дискретизацией оператора T масштаба j . В базисе $\varphi_{j,k}^i(x,y)$ с оператором T_0 можно связать матрицу T_0 размера $2^j \times 2^j$.

Введем ортогональную матрицу

$$W_{j-1} = \begin{bmatrix} Q_{j-1} \\ P_{j-1} \end{bmatrix}, \tag{3}$$

где P_{j-1} и Q_{j-1} – матричное представление проекторов P_{j-1} и Q_{j-1} соответственно. Пусть $x_j = P_j x$ и $y_j = P_j y$ – дискретизации элементов x и y из $L^2(0,1)$. Для того, чтобы свести

$$T_j x_j = y_j \tag{4}$$

к масштабу $j-1$, применим (3) и (4)

$$(W_{j-1} T_j W_{j-1})(W_{j-1} x_j) = (W_{j-1} y_j). \tag{5}$$

Получим

$$\begin{bmatrix} A_{j-1} & B_{j-1} \\ C_{j-1} & T_{j-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{d}_{j-1} \\ \tilde{s}_{j-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_j \\ s_j \end{bmatrix}, \tag{6}$$

где $d_j = Q_j y$, $s_j = P_j y$, $\tilde{d}_{j-1} = Q_{j-1} x$, $\tilde{s}_{j-1} = P_{j-1} x$, в то время как A_{j-1} , B_{j-1} и C_{j-1} – матричные операторы

$$\begin{aligned} A_{j-1} : W_{j-1} &\rightarrow W_{j-1} & A_{j-1} &= Q_{j-1} T Q_{j-1} \\ B_{j-1} : W_{j-1} &\rightarrow W_{j-1} & B_{j-1} &= Q_{j-1} T P_{j-1} \\ C_{j-1} : W_{j-1} &\rightarrow V_{j-1} & C_{j-1} &= P_{j-1} T Q_{j-1} \\ T_{j-1} : V_{j-1} &\rightarrow V_{j-1} & T_{j-1} &= P_{j-1} T P_{j-1} \end{aligned} .$$

Матрицы A_{j-1} , B_{j-1} и C_{j-1} содержат уточняющую информацию об операторе T_{j-1} . На следующем шаге матрица T_{j-1} извлекается из (6), и к ней применяется ортогональная матрица W_{j-2} , как и в (5). Эта процедура продолжается на всех масштабах $j = n-1, \dots, 0$. Результатом является нестандартная форма (NS-форма) исходной матрицы T_0 . Для $j_0 = 3$ NS-форма матрицы T_0 показана на рис. 1. Здесь \tilde{d}_j, \tilde{s}_j и \tilde{d}_j, \tilde{s}_j связаны соотношениями

$$\begin{aligned} \tilde{d}_j &= A_j \tilde{d}_j + B_j \tilde{s}_j, \\ \tilde{s}_j &= C_j \tilde{d}_j, \quad j = j_0 - 1, \dots, 0, \end{aligned}$$

и на последнем шаге

$$\bar{s}_0 = C_0 \tilde{d}_0 + T_0 \tilde{s}_0.$$

Для того, чтобы конвертировать $\{\tilde{d}_j, \tilde{s}_j\}_{0 \leq j \leq j_0-1}$ в вейвлет-представление $\{\{d_j\}_{0 \leq j \leq j_0-1}, s_0\}$,

следует воспользоваться алгоритмом:

1. $\bar{d}_{j_0-1} = 0, \bar{s}_{j_0-1} = 0.$
2. $\bar{d}_j = Q_j(\tilde{s}_{j-1} + \bar{s}_{j-1}), \bar{s}_j = P_j(\tilde{s}_{j-1} + \bar{s}_{j-1}).$
3. Тогда $d_j = \tilde{d}_j + \bar{d}_j$, а на последнем шаге $s_0 = \tilde{s}_0 + \bar{s}_0.$

Пусть система функций $\psi_k(t)$ ортогональна и

$$x(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k \psi_k(t),$$

где коэффициенты c_k вычисляются по функции

$$c_k = \int f(t) \psi_k(t) dt.$$

Если $\psi_k(t)$ имеют нулевые моменты

$$0 = \int t^m \psi_k(t) dt, 0 \leq m \leq n-1,$$

тогда функция f хорошо аппроксимируется многочленом $\leq n-1$. Коэффициенты разложения будут малыми или нулевыми. Поэтому вейвлеты, имеющие нулевые моменты, могут использоваться для «сжатия» гладких данных.

Если T является интегральным оператором и его ядро – гладкая функция вне диагонали, то матрица, полученная «дискретизацией», имеет много малых элементов вне диагонали. Такие матрицы после «сжатия» имеют разреженное представление в вейвлет-базисе. Поэтому NS-форма матрицы после «сжатия» становится сильно разреженной.

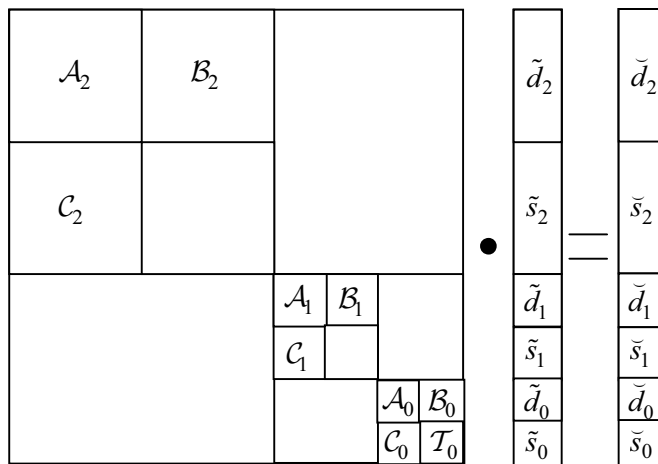


Рис. 1. Матричное уравнение в нестандартном представлении.

Алгоритм

Рассмотрим алгоритм решения СЛУ методом нестандартного представления в вейвлет-базисе. Его общий вид можно увидеть на рис. 2.



Рис. 2. Алгоритм.

Прокомментируем шаг 2. Выше уже описывался способ построения нестандартной формы матрицы, но для данного алгоритма предлагается совместить его с LU-разложением (более подробное описание данного подхода можно увидеть в работе [2]). Результирующая процедура получится более эффективной, чем если бы нестандартное и LU-разложения применялись независимо.

В начале рассчитаем вейвлет-разложение оператора T_n для «первого» масштаба:

$$T_n = A_{n-1} + B_{n-1} + C_{n-1} + T_{n-1},$$

где

$$A_{n-1} = Q_{n-1} T_n Q_{n-1},$$

$$B_{n-1} = Q_{n-1} T_n P_{n-1},$$

$$C_{n-1} = P_{n-1} T_n Q_{n-1},$$

$$T_{n-1} = P_{n-1} T_n P_{n-1}.$$

Используя стандартное LU-разложение, получим:

$$A_{n-1} = L_{n-1} U_{n-1},$$

и зададим $\hat{A}_{n-1} = L_{n-1}$ и $\tilde{A}_{n-1} = U_{n-1}$. Имея \hat{A}_{n-1} и \tilde{A}_{n-1} , можно получить \tilde{B}_{n-1} и \hat{C}_{n-1} решая

$$\hat{A}_{n-1} \tilde{B}_{n-1} = B_{n-1},$$

$$\hat{C}_{n-1} \tilde{A}_{n-1} = C_{n-1}$$

с помощью стандартных методов прямого и обратного прохода.

Для продолжения на следующем масштабе необходимо вейвлет-разложение оператора T_{n-1} и $\hat{C}_{n-1}\tilde{B}_{n-1}$. Эти процедуры могут быть скомбинированы, если вначале вычесть $\hat{C}_{n-1}\tilde{B}_{n-1}$ из T_{n-1} , а затем рассчитать

$$T_{n-1} - \hat{C}_{n-1}\tilde{B}_{n-1} = (A_{n-2} - \bar{A}_{n-2}) + (B_{n-2} - \bar{B}_{n-2}) + (C_{n-2} - \bar{C}_{n-2}) + (T_{n-2} - \bar{T}_{n-2}), \quad (7)$$

где

$$A_{n-2} - \bar{A}_{n-2} = Q_{n-2} (T_{n-1} - \hat{C}_{n-1}\tilde{B}_{n-1}) Q_{n-2},$$

$$B_{n-2} - \bar{B}_{n-2} = Q_{n-2} (T_{n-1} - \hat{C}_{n-1}\tilde{B}_{n-1}) P_{n-2},$$

$$C_{n-2} - \bar{C}_{n-2} = P_{n-2} (T_{n-1} - \hat{C}_{n-1}\tilde{B}_{n-1}) Q_{n-2},$$

$$T_{n-2} - \bar{T}_{n-2} = P_{n-2} (T_{n-1} - \hat{C}_{n-1}\tilde{B}_{n-1}) P_{n-2}.$$

Используя стандартное LU-разложение, получим

$$A_{n-2} - \bar{A}_{n-2} = L_{n-2} U_{n-2},$$

где $\hat{A}_{n-2} = L_{n-2}$ и $\tilde{A}_{n-2} = U_{n-2}$. Имея \hat{A}_{n-2} и \tilde{A}_{n-2} , можно получить \tilde{B}_{n-2} и \hat{C}_{n-2} решая

$$\hat{A}_{n-2}\tilde{B}_{n-2} = B_{n-2} - \bar{B}_{n-2},$$

$$\hat{C}_{n-2}\tilde{A}_{n-2} = C_{n-2} - \bar{C}_{n-2},$$

с помощью стандартных методов прямого и обратного прохода.

Для продолжения необходимо рассчитать вейвлет-разложение T_{n-2} , $\hat{C}_{n-2}\tilde{B}_{n-2}$ и дополнительного члена \bar{T}_{n-2} из равенства (7).

$$T_{n-2} - \hat{C}_{n-2}\tilde{B}_{n-2} - \bar{T}_{n-2} = (A_{n-3} - \bar{A}_{n-3}) + (B_{n-3} - \bar{B}_{n-3}) + (C_{n-3} - \bar{C}_{n-3}) + (T_{n-3} - \bar{T}_{n-3}),$$

где

$$A_{n-3} - \bar{A}_{n-3} = Q_{n-3} (T_{n-2} - \hat{C}_{n-2}\tilde{B}_{n-2} - \bar{T}_{n-2}) Q_{n-3},$$

$$B_{n-3} - \bar{B}_{n-3} = Q_{n-3} (T_{n-2} - \hat{C}_{n-2}\tilde{B}_{n-2} - \bar{T}_{n-2}) P_{n-3},$$

$$C_{n-3} - \bar{C}_{n-3} = P_{n-3} (T_{n-2} - \hat{C}_{n-2}\tilde{B}_{n-2} - \bar{T}_{n-2}) Q_{n-3},$$

$$T_{n-3} - \bar{T}_{n-3} = P_{n-3} (T_{n-2} - \hat{C}_{n-2}\tilde{B}_{n-2} - \bar{T}_{n-2}) P_{n-3}.$$

Процесс продолжается до масштаба n , где рассчитываются члены \hat{T}_0 и \tilde{T}_0 .

Программа

На основе вышеприведенного алгоритма нами была разработана программа¹ для решения СЛАУ. В качестве языка программирования был выбран Fortran90, для работы с сильно разреженными матрицами была использована библиотека SPARSKIT2.

Основную работу выполняет процедура *solveUsingNSForm*, на вход которой подается матрица коэффициентов, вектор свободного члена, векторы коэффициентов материнской и вейвлет-функций, количество вейвлет-преобразований, которое необходимо будет проделать над матрицей коэффициентов в процессе получения нестандартной формы, и переменная, в которой будет возвращен вектор неизвестных. Стоит отметить, что все матрицы и векторы передаются в сжатом формате (так называемый, формат CSR).

Работу процедуры *solveUsingNSForm* можно разделить на 5 частей.

1. *Расчет нестандартного представления для матрицы коэффициентов.* Это работу проделывает процедура *createNSForm2Dim*. Ей на вход подается матрица, которую необходимо преобразовать, векторы коэффициентов материнской и вейвлет-функций, количество преобразований и переменные, в которых будут возвращены верхнетреугольное

¹ В момент написания данной статьи программа проходила процесс регистрации в ФГНУ «Государственном координационном центре информационных технологий» Федерального Агентства по Образованию.

и нижнетреугольные нестандартные представления исходной матрицы. Данная процедура выполняется, четко следуя шагу 2 вышеприведенного алгоритма.

2. *Расчет нестандартного представления для вектора свободного члена.* Для этого используется процедура *createNSForm1Dim*. Ей на вход подается вектор свободного члена, векторы коэффициентов материнской и вейвлет-функций, количество преобразований и переменная, в которой будет возвращен результат – нестандартная форма вектора. В процессе выполнения данной процедуры исходный вектор претерпевает заданное количество вейвлет-преобразований, причем получающиеся векторы запоминаются в переменную-результат.

3. *Решение первого уравнения (см. шаг 5 алгоритма) в нестандартной форме методом прямого прохода.* Для этого используется процедура *nsForwardSubstitution*. На вход подается нижнетреугольная нестандартная форма, вектор свободного члена в нестандартном представлении, векторы коэффициентов материнской и вейвлет-функций и переменная, в которой вернется результат решения.

4. *Решение второго уравнения (см. шаг 6 алгоритма) в нестандартной форме методом обратного прохода.* Эту работу выполняет процедура *nsBackwardSubstitution*. На вход подается верхнетреугольная нестандартная форма, результат, полученный на предыдущем шаге, векторы коэффициентов материнской и вейвлет-функций, переменная, в которой вернется результат решения.

5. *Обратное вейвлет-преобразование для получения вектора решения в стандартной форме.* Для этого используется процедура *inverseWaveletTrans1Dim*, на вход которой подается вектор материнских и вейвлет-коэффициентов первого масштаба искомого вектора, векторы коэффициентов материнской и вейвлет-функций, переменная, в которой вернется результирующий вектор.

Для проведения всех стандартных действий над матрицами и векторами используются процедуры и функции из библиотеки SPARSKIT2. Она содержит процедуры для преобразования матриц из стандартного формата в «сжатый» и обратно, решения СЛАУ методами прямого и обратного прохода, LU-разложения матрицы, умножения и сложения матриц и так далее.

Численные результаты

В этом разделе представлены численные результаты обработки нескольких примеров для демонстрации быстродействия и точности алгоритма и программы. Для тестирования был выбран компьютер с процессором Intel(R) Pentium(R) 4 CPU 3,00GHz с 2048Mb оперативной памяти.

Пример 1. Для первого примера была выбрана матрица вида:

$$A_{i,j} = \begin{cases} C / \tan(\pi(i-j)/N), & i \neq j, \\ 1, & i = j, \end{cases}$$

где $N = 2^n$ – размерность матрицы, $i, j = 1..2^n$ и $C = 1/2^n$. Правая часть матричного уравнения подбиралась так, чтобы существовало известное точное решение.

Данная СЛАУ была решена при помощи нестандартного представления и при помощи библиотеки *Lapack*. Из этого пакета была выбрана процедура *DSGESV*, реализующая один из наиболее часто используемых итерационных алгоритмов решения СЛАУ. Более подробно об этом алгоритме можно узнать из документации, расположенной по адресу <http://www.netlib.org/lapack>.

Результаты можно увидеть в табл. 1.

Таблица 1

N	T_{NS}	$L_{\infty}(NS)$	$L_2(NS)$	T_{Lapack}	$L_{\infty}(Lapack)$	$L_2(Lapack)$
2^9	0,68	$1,74 \cdot 10^{-4}$	$4,59 \cdot 10^{-4}$	0,78	$3,11 \cdot 10^{-15}$	$1,36 \cdot 10^{-14}$
2^{10}	3,35	$4,25 \cdot 10^{-4}$	$1,19 \cdot 10^{-3}$	6,18	$3,33 \cdot 10^{-15}$	$2,48 \cdot 10^{-14}$
2^{11}	19,32	$6,53 \cdot 10^{-4}$	$2,25 \cdot 10^{-3}$	48,18	$9,05 \cdot 10^{-15}$	$8,39 \cdot 10^{-14}$

В первом столбце этой таблицы находится размерность обрабатываемой матрицы, во втором время в секундах работы алгоритма на основе нестандартного представления, в третьем и четвер-

том ошибка данного алгоритма, в пятом время работы в секундах процедуры из библиотеки *Lapack*, в двух оставшихся – ошибка этой процедуры.

Пример 2. Во втором примере использовалась матрица вида:

$$A_{i,j} = \begin{cases} \sin(\pi(i-j)/N), & i \neq j, \\ 1, & i = j \end{cases}$$

где $N = 2^n$ – размерность матрицы и $i, j = 1..2^n$. Правая часть данного матричного уравнения подбиралась так, чтобы существовало известное точно решение.

Результаты можно увидеть в табл. 2, построенной аналогично табл. 1.

Таблица 2

N	T_{NS}	$L_{\infty}(NS)$	$L_2(NS)$	T_{Lapack}	$L_{\infty}(Lapack)$	$L_2(Lapack)$
2^9	0,73	$1,46 \cdot 10^{-4}$	$1,01 \cdot 10^{-3}$	0,78	$5,81 \cdot 10^{-13}$	$3,73 \cdot 10^{-12}$
2^{10}	1,83	$1,58 \cdot 10^{-3}$	$3,54 \cdot 10^{-2}$	6,15	$1,54 \cdot 10^{-12}$	$1,24 \cdot 10^{-11}$
2^{11}	8,14	$1,47 \cdot 10^{-3}$	$2,81 \cdot 10^{-2}$	48,59	$4,17 \cdot 10^{-12}$	$4,91 \cdot 10^{-11}$

Здесь стоит отметить, что, хотя алгоритм на основе нестандартного представления работает и быстрее, чем процедура из библиотеки *Lapack*, но точность полученного решения у него существенно ниже. Снижение точности происходит вследствие трешолдинга, производимого в момент вейвлет-преобразования и LU-разложения. Суть трешолдинга состоит в том, что величины меньше некоего заданного порога считаются равными нулю. Все предыдущие примеры обрабатывались с порогом равным 10^{-5} . В табл. 3 можно увидеть, как будет меняться точность и время решения, если уменьшать этот порог.

Таблица 3

Порог	T_{NS}	$L_{\infty}(NS)$	$L_2(NS)$
10^{-8}	43,55	$1,51 \cdot 10^{-8}$	$7,75 \cdot 10^{-8}$
10^{-9}	44,38	$1,29 \cdot 10^{-9}$	$2,13 \cdot 10^{-9}$
10^{-11}	48,01	$6,78 \cdot 10^{-12}$	$7,84 \cdot 10^{-11}$

Таким образом, видно, что для порога равного 10^{-11} , ошибка решения становится одного порядка с ошибкой процедуры *Lapack*. Что касается времени выполнения, то оно также становится сравнимым. Однако, стоит взглянуть что произойдет на следующей размерности матрицы (табл. 4).

Таблица 4

N	T_{NS}	$L_{\infty}(NS)$	$L_2(NS)$	T_{Lapack}	$L_{\infty}(Lapack)$	$L_2(Lapack)$
2^{12}	362,87	$1,31 \cdot 10^{-10}$	$5,01 \cdot 10^{-10}$	387,36	$1,46 \cdot 10^{-11}$	$2,03 \cdot 10^{-10}$

Время работы алгоритма на основе нестандартного представления сопоставимо и даже несколько меньше, чем время работы итерационного алгоритма при сравнимой ошибке. Стоит отметить, что для вейвлет-преобразований, подбирая вейвлет-функцию, можно добиться существенно-большого числа нулей в результате, а значит, увеличить общую скорость. Для данных примеров использовалась вейвлет-функция D4 (Добеша 4 порядка).

Итак, можно сделать вывод о том, что алгоритм решения СЛАУ на основе нестандартного представления работает сравнимо по времени выполнения и по ошибке результата с итерационными алгоритмами.

Литература

1. Добеша, И. Десять лекций по вейвлетам / И. Добеша. – Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика». – 2001. – 464 с.
2. David L. Gines LU Factorization of Non-Standard Forms and Direct Multiresolution Solver / David L. Gines, G. Beylkin, J. Dunn. – Appl. Comput. Harmon. Anal. – 1998. – № 5(2). – P. 156–201.

Поступила в редакцию 9 июня 2007 г.

ПОСТРОЕНИЕ ПОТЕНЦИАЛА ЕАМ-ТИПА ПО СТРУКТУРНЫМ ДАННЫМ ЖИДКОСТИ И КРИСТАЛЛА

А.Г. Воронцов, А.А. Мирзоев

В статье предлагается методика построения межчастичного ЕАМ-потенциала по данным дифракционных экспериментов в жидком и кристаллическом состоянии для молекулярно-динамического моделирования процессов плавления и кристаллизации металлов. Предлагаемая методика использована для построения ЕАМ-потенциала для моделирования расплава меди в широком диапазоне температур.

Введение

Моделирование процессов, происходящих на атомном и молекулярном уровне, занимает существенное место в современной науке о материалах. Один из основных вопросов, необходимых для запуска процесса моделирования, это определение потенциалов взаимодействия между атомами. Известно, что взаимодействие не подчиняется простым закономерностям и зависит как от внешних термодинамических условий, так и от присутствия в системе малейшего количества атомов другого сорта.

Самая простая форма взаимодействия, которая лежит в основе большинства моделей – парное взаимодействие. Наиболее распространенными являются парные потенциалы самого простого вида, потенциал Леннарда–Джонса, Морзе, Юкавы и др., параметры которых могут быть подобраны для описания той или иной системы. Простая форма потенциалов позволяет получить только качественное согласие моделей с реальными системами. Для количественного описания реальных систем были предложены методы Шоммерса [1] и Реатто [2], восстановления парного потенциала взаимодействия из данных эксперимента (экспериментальной функции радиального распределения атомов). Это методы, в которых реализована итерационная процедура получения парного потенциала, приводящего в процессе моделирования МД к заданной функции радиального распределения. Данные методы оказались полезны для получения потенциалов взаимодействия одно и несколько компонентных жидких и аморфных систем [3].

При выборе взаимодействия в парном виде возникает ряд противоречий с реальным поведением атомных систем. При помощи парного потенциала невозможно описание систем, в которых образуются направленные связи, например ковалентные, кристаллизация происходит только в ПУ решетки, в кристаллах не выполняется соотношение Коши [4] и т.д. Кроме того, в реальных веществах потенциал изменяется при изменении термодинамических условий, что не позволяет использовать табулированную форму потенциала для решения большого класса.

Реалистичное взаимодействие между атомами можно получить только с учетом электронной подсистемы и ее изменения при изменении температуры и плотности. Распределение электронов можно определить методом функционала электронной плотности или квантового Монте-Карло, а затем найти силы, действующие на атомы системы, но нахождение равновесной конфигурации электронов занимает на порядок больше времени, чем моделирование движения ионов (атомов). Успехи, достигнутые в распространении метода *ab-initio* молекулярной динамики на большие системы крайне скромны. Она позволяет проследить движение порядка 200 ионов на интервале времени около 100 пс. Для моделирования больших систем она оказывается непригодной из-за огромных затрат вычислительных ресурсов.

Несомненное достоинство методов *ab-initio* состоит в том, что при моделировании возможно наблюдать распределение электронов и процесс формирования химических связей. Кроме того, информация о взаимодействии ионов в той или иной ситуации может подсказать, как упростить вычисление этого взаимодействия и заменить его некоторым модельным приближением. Эта

идея получила свое развитие в потенциалах погруженного атома, разработанных впервые Доу и Баскесом [4].

Их идеи повторяют идеи метода функционала плотности, только вместо решения самосогласованных уравнений Теории Функционала Плотности авторы предложили разделить электронную плотность атомов окружения и центрального атома. При такой формулировке потенциал, действующий на атом, состоит из двух частей:

$$U_i = F_i(\rho_i) + \sum_{j \neq i} \phi_{ij}(r) \quad (1)$$

парного взаимодействия ионов $\phi_{ij}(r)$ и взаимодействия иона с остальной системой $F_i(\rho_i)$ посредством электронной плотности $\rho_i = \sum_{j \neq i} \psi_{ij}(r)$, где $\psi_{ij}(r)$ – электронная плотность, создаваемая

j атомом в точке, где находится атом i . Параметры функций взаимодействия, по мнению авторов, необходимо определять из каких-либо дополнительных источников. Для потенциала ЕАМ типа скорость вычисления сил, действующих на атомы, сравнима по быстродействию с таковой для парных потенциалов, но ЕАМ-потенциал позволяет решить фундаментальные противоречия имеющиеся для парного взаимодействия.

В серии статей Баскес, Доу, Фоилс [5–7] предложили форму потенциалов, позволяющих правильно воспроизводить параметры кристаллических Cu, Ag, Au, и других металлов. Основными свойствами, под которые подгонялся потенциал, были: постоянная решетки кристалла, упругие константы, уравнение состояния Росе [8], энергия сублимации, энергия образования вакансии. Долгое время эти потенциалы служили «рабочими» потенциалами для получения интересных результатов, но бурное развитие методов расчета из первых принципов и возрастающие требования к точности модельных расчетов привели к тому, что появилось множество работ, в которых получены новые потенциалы в форме погруженного атома.

Последние работы [9, 10], направленные на получение потенциалов ЕАМ-типа рассматривают все функции, входящие в потенциал, как подгоночные, направленные на правильное воспроизведение экспериментальных свойств. Предложены схемы подгонки потенциала для точного описания температуры плавления [11], сил, полученных методом *ab-initio* [12], структурного фактора жидкости [13], структурных и термодинамических свойств жидкости [10]. Стоит отметить, что все потенциалы удовлетворительно работают только в небольшом диапазоне температур и испытывают значительные трудности при решении задач, связанных с фазовыми переходами в системе. Например, потенциалы, основанные только на свойствах кристалла, не воспроизводят с нужной точностью свойства жидкости и наоборот. Для получения потенциалов погруженного атома хорошо описывающих и жидкость и кристалл наиболее приемлемой является комбинация классического метода для кристалла [4] с методом, недавно предложенным для жидкости [10, 14]. При таком подходе можно точно воспроизвести структурные свойства жидкости, энергию сублимации, изотермический модуль сжатия, кроме того, оставшиеся параметры позволяют получить правильный параметр решетки кристалла и упругие константы.

Метод

Определения функций, входящих в ЕАМ-потенциал происходило в два этапа. Сначала выбиралась жидкая система недалеко от точки плавления с известной из эксперимента функцией радиального распределения. При этих термодинамических условиях подбирался парный потенциал, при проведении молекулярно-динамического моделирования с которым максимально точно воспроизводились структурные свойства системы (ФРП и давление близкое к нулевому). Затем подбиралась функция погружения, правильно воспроизводящая уравнение состояния в области твердой и жидкой фазы, при различных термодинамических условиях. Подробности метода приведены ниже.

Построение парной части потенциала

Для построения парной части ЕАМ-потенциала меди нами использовалась схема, предложенная Белашенко [10]. Эффективная сила, действующая на атом i со стороны атома j равна

$$f_{ij} = - \left[\frac{dF_i}{d\rho} \Big|_{\rho=\rho_i} + \frac{dF_j}{d\rho} \Big|_{\rho=\rho_j} \right] \frac{d\psi_{ij}}{dr} \Big|_{r=r_{ij}} - \frac{d\phi}{dr} \Big|_{r=r_{ij}}. \quad (2)$$

В работах [10, 14] было показано, что на этапе выбора потенциалов в уравнении (2) можно приближенно заменить сумму производных $s = \frac{dF_i}{d\rho} \Big|_{\rho=\rho_i} + \frac{dF_j}{d\rho} \Big|_{\rho=\rho_j}$ средним значением этой сум-

мы по всем частицам $s = 2 \frac{dF}{d\rho} \Big|_{\rho=\langle\rho\rangle}$. На самом деле, сумма s зависит от выбранной пары частиц и

от времени, однако если система достаточно плотная и флуктуации плотности не слишком велики, то сумма s может флуктуировать с относительно небольшой амплитудой и ее можно приближенно принять постоянной. Это существенно упрощает вычисления. Если это предположение принять, то для определенных термодинамических условий на основе уравнения (2) можно свести все взаимодействия в системе к парным взаимодействиям с суммарной эффективной силой:

$$f_{ij} = -2 \frac{dF}{d\rho} \Big|_{\rho=\langle\rho\rangle} \cdot \frac{d\psi_{ij}}{dr} \Big|_{r=r_{ij}} - \frac{d\phi}{dr} \Big|_{r=r_{ij}}, \quad (3)$$

где среднее значение электронной плотности на атомах системы можно вычислить через функцию радиального распределения:

$$\langle\rho\rangle = 4\pi \frac{N}{V} \int_0^\infty g(r)r^2\psi(r)dr. \quad (4)$$

Выражение (3) позволяет сразу найти парную часть ЕАМ-потенциала, если рассмотреть систему в точке, где $\frac{dF}{d\rho} = 0$. Для этого, как и в работе [10], можно воспользоваться методом Шоммерса [1].

Выбор электронной плотности

Зависимость безразмерной электронной плотности от расстояния до центра атома можно задать в простом виде [10]:

$$\psi(r) = p_1 \exp(-p_2 \cdot r). \quad (5)$$

Параметр p_2 выбирается из условия подобия – эмпирического наблюдения [3, 10, 14] о том, что спадание электронной плотности у атома в металле пропорционально положению первого пика функции радиального распределения. Коэффициент p_1 определялся из условия нормировки средней плотности (выражение (4)) на единицу при определенной температуре.

Определение функции погружения

Известно, что функция погружения $F(\rho)$ по своему смыслу равна 0 при $\rho = 0$ и имеет минимум при равновесном значении ρ [4], кроме того, существуют масштабные преобразования для ЕАМ-потенциала, не изменяющих силы, действующие в системе:

$$\begin{aligned} \rho(r) &\rightarrow s * \rho(r), \\ F(\rho) &\rightarrow F(\rho/s), \\ F(\rho) &\rightarrow F(\rho) + g * \rho, \\ \phi(r) &\rightarrow \phi(r) - 2g * \rho(r). \end{aligned} \quad (6)$$

Подбором параметров s и g можно привести потенциал к каноническому виду, когда энергия погружения имеет минимальное значение в точке термодинамического равновесия. Кроме того, можно нормировать электронную плотность (что мы и сделали) таким образом, чтобы положение минимума функции $F(\rho)$ приходилось на значение электронной плотности равное 1.

В разных работах выбиралась различная функция погружения, например в работе [10] функция вида:

$$\begin{cases} F(\rho) = \alpha\sqrt{\rho} + \beta\rho & \rho < 0,8\rho_0, \\ F(\rho) = a_0 + a_2(\rho - \rho_0)^2 + a_3(\rho - \rho_0)^3 & \rho > 0,8\rho_0, \end{cases} \quad (7)$$

где коэффициенты α и β определяются из условия гладкой сшивки функции погружения в точке $\rho = 0,8\rho_0$. Выбор функции погружения в виде (7) позволяет удовлетворить требованиям ра-

венства $F(\rho) = 0$ и минимума F в точке $\rho = \rho_0 = 1$. Параметры a_1, a_2, a_3 определялись по полной энергии, коэффициенту изотермической сжимаемости и высокотемпературному уравнению состояния [10].

Нами предлагается использовать экспериментальное уравнение состояния, как в кристаллической, так и в области жидкости. Можно заметить, что физически допустимому для кристалла и расплава изменению средней электронной плотности $\langle \rho \rangle$ соответствует диапазон от 0,80 (нагретая жидкость) до 1,2 (кристалл при комнатной температуре). Запишем давления, которые создают парная и EAM части потенциала:

$$pV(EAM) = -\frac{1}{3} \sum_{j<i} f_{ij}(EAM) \cdot r_{ij} = \frac{1}{3} \sum_{i<j} 2 \frac{dF}{d\rho} \Big|_{\rho=\langle \rho \rangle} * \frac{d\psi_{ij}}{dr} \Big|_{r=r_{ij}}, \quad (8)$$

$$pV(pair) = -\frac{1}{3} \sum_{j<i} f_{ij}(pair) \cdot r_{ij} = \frac{1}{3} \sum_{i<j} \frac{d\phi_{ij}}{dr} \Big|_{r=r_{ij}}, \quad (9)$$

откуда, заменяя суммирование интегрированием, получаем

$$pV \approx \frac{2N}{3V} 4\pi \frac{dF}{d\rho} \int_0^\infty \frac{d\psi}{dr} r^3 g(r) dr + \frac{1N}{3V} 4\pi \int_0^\infty \frac{d\phi}{dr} r^3 g(r) dr; \quad (10)$$

где производная берется при среднем значении плотности в системе, полученной из выражения (4). Проводя моделирование и приравнявая к 0 давление в системе можно получить условие для производной функции погружения:

$$\frac{dF}{d\rho} = - \int_0^\infty \frac{d\phi}{dr} r^3 g(r) dr \cdot \left[2 \int_0^\infty \frac{d\psi}{dr} r^3 g(r) dr \right]^{-1}, \quad (11)$$

где точка взятия производной определяется выражением (4). Уравнения (4), (8), (10) записаны в предположении, что можно пренебречь флуктуациями атомной плотности, что, конечно, проверяется при моделировании.

Результаты и обсуждение

Мы проводили построение EAM-потенциала меди. Температура 1423 К была выбрана в качестве опорной точки построения потенциала т.к. для этой температуры известны данные дифракционных экспериментов [15]. Парный потенциал взаимодействия вычислялся методом Шоммерса [1], который позволяет построить парный потенциал, воспроизводящий при моделировании экспериментальную ФРП. Точность воспроизведения данных эксперимента оценивалась при помощи невязки:

$$R = \left\{ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N [g(r_i) - g_0(r_i)]^2 \right\}^{1/2}, \quad (12)$$

где $g(r)$ и $g_0(r)$ – модельная и экспериментальная функции радиального распределения, заданные в точках r_i . При моделировании невязка составила 0,02, при этом две функции радиального распределения практически неразличимы. Экспериментальная и модельная функции радиального распределения приведены на рис. 1. Моделирование проводилось в NVT-ансамбле, но коррекцией потенциала мы добивались обращения давления в 0. При моделировании было получено значение давления 0,04 ГПа, что является малой величиной в сравнении с флуктуациями давления при моделировании. Полученный парный потенциал приведен на рис. 2.

Для меди параметр p_2 был найден из условия подобия [14] и равнялся $1,6 \text{ \AA}^{-1}$. Коэффициент p_1 , найденный из условия $\langle \rho \rangle = 1$, равен 4,85. Для определения функции погружения строились модели различного объема и температуры, в которых вычислялась $g(r)$, и из условия 11 находилась производная функции погружения. График функции погружения в области равновесных значений электронной плотности приведен на рис. 3.

Оптимизация функции погружения проводилась путем подгонки модели под реальное уравнение состояния меди. Для этого строился ряд моделей кристаллической меди при температурах 300–1300 К и моделей расплава меди при температурах 1423–1873 К. Модели содержали 4000 атомов и строились в NVT-ансамбле при экспериментальных значениях объема и температуры.

Моделирование с чистым парным потенциалом, подобранным для температуры 1423 К приводит к появлению значительных давлений в модельной системе, значения которых приведены во втором столбце таблицы.

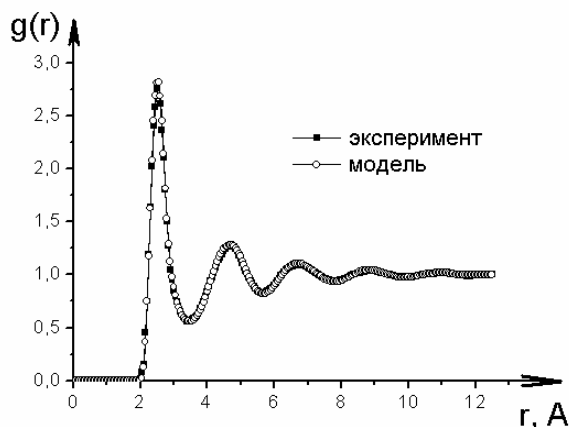


Рис. 1. Модельная и экспериментальная функции радиального распределения для меди при температуре 1423 К

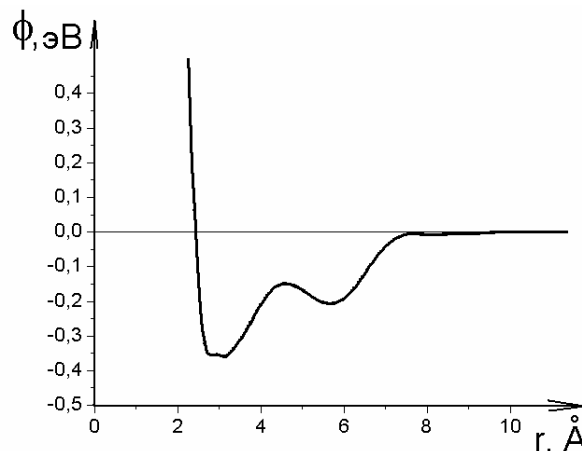


Рис. 2. Парный потенциал взаимодействия для расплава меди при температуре 1423 К

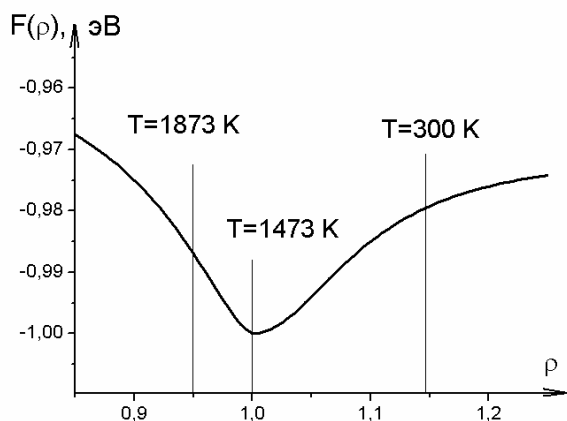


Рис. 3. Функция погружения. Вертикальными линиями показаны средние значения электронной плотности при различных температурах

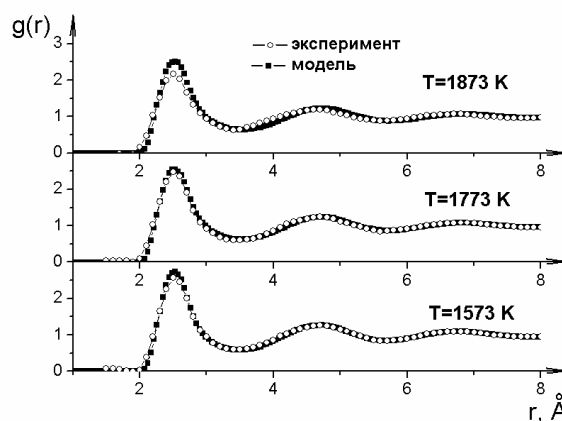


Рис. 4. Экспериментальные [15] и модельные функции радиального распределения расплава меди для ряда температур

Подбор функции погружения производился с целью приведения давления в системе при всех значениях температуры к экспериментальному (близкому к 0) значению. Значения давлений в моделях кристаллической и жидкой меди для полного ЕАМ-потенциала приведено во втором столбце таблицы. Как видно из таблицы, не удастся привести к 0 давления при всех температурах, но удастся сделать его отклонение от 0 несущественным.

Давление в модельной системе при разной температуре и разном потенциале взаимодействия

	T, K	Парный потенциал P, bar	ЕАМ потенциал P, bar
кристалл	300	-5 497	6 788
	500	-18 051	-2 879
	700	-24 742	-6 292
	900	-28 859	-6 862
	1 100	-29 152	-4 433
	1 300	-25 420	35
жидкость	1 473	-399	6 133
	1 573	1 239	2 045
	1 773	3 584	-5 434
	1 873	6 244	-5 185

Проверка полученного потенциала для кристалла проводилась моделированием в NPT-ансамбле и проверкой равновесного параметра решетки. Найдено, что построенный EAM-потенциал воспроизводит экспериментальный параметр решетки для всех температур 300–1300 К с точностью более 0,3 %. Поскольку одновременно достигается близкая к нулю (и, следовательно, к равновесному значению) величина давления в системе, то построенный межчастичный потенциал успешно воспроизводит уравнение состояния кристалла. Сравнение моделей жидкости для температур 1573–1873 К с данными эксперимента проводилось по функциям радиального распределения. На рис. 4 приведены графики модельных и экспериментальных функций радиального распределения Васеды [15]. Можно заметить, что полученные модели достаточно точно воспроизводят $g(r)$, что свидетельствует о способности предлагаемого потенциала одновременно воспроизводить и широкую область жидкой фазы меди.

Заключение

Предложена схема построения EAM-типа на основе структурных данных жидкости и кристалла. Моделирование меди с полученным потенциалом показало хорошее согласие с фактическим уравнением состояния для меди, как в жидкой, так и в кристаллической фазе.

Работа выполнена при поддержке РФФИ-DFG, грант 07-03-91558-ННИО_а и гранта губернатора Челябинской области, урчел_07-03-96038.

Литература

1. Schommers, W. Pair potentials in disordered many particle systems: A study for liquid gallium / W. Schommers // *Phys. Rev. A.* – 1983. – V. 28. – P. 3599–3605.
2. Reatto, L.. Iterative predictor-corrector method for extraction of the pair interaction from structural data for dense classical liquids / L. Reatto, D. Levesque, J.J. Weis // *Phys. Rev. A.* – 1986. – V. 33. – P. 3451–3465.
3. Белашенко, Д.К. Компьютерное моделирование жидких и аморфных веществ / Д.К. Белашенко. – М.: МИСИС, 2005. – 408 с.
4. Daw Murray, S. Embedded-atom method: derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals / S. Daw Murray, M.I. Baskes // *Phys. Rev. B.* – 1984. – V. 29. – P. 6443–6453.
5. Foiles, S.M. Embedded-atom-method functions for the fcc metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys / S.M. Foiles, M.I. Baskes, M.S. Daw // *Phys. Rev. B.* – 1986. – V. 33. – P. 7983–7991.
6. Daw Murray, S. Model of metallic cohesion: The embedded-atom method / S. Daw Murray // *Phys. Rev. B.* – 1989. – V. 39. – P. 7441–7452.
7. Baskes, M.I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities / M.I. Baskes // *Phys. Rev. B.* – 1992. – V. 46. – P. 2727–2742.
8. Universal features of the equation of states of metals / H. Rose James, R. Smith John, F. Guinea, J. Ferrante // *Phys. Rev. B.* – 1984. – V. 29. – P. 2963–2969.
9. Nam, H.S. Solid-liquid phase diagrams for binary metallic alloys: Adjustable interatomic potentials / H.S. Nam, M.I. Mendeleev, D.J. Srolovitz // *Phys. Rev. B.* – 2007. – V. 75. – P. 014204.
10. Белашенко, Д.К. Применение модели погруженного атома к жидким металлам. Жидкое железо / Д.К. Белашенко // *Журнал физической химии.* – 2006. – Т. 80. – С. 1–11.
11. Sturgeon Jess, B. Adjusting the melting point of a model system via Gibbs-Duhem integration: Application to a model of aluminum / B. Sturgeon Jess, B. Laird Brian // *Phys. Rev. B.* – 2000. – V. 62. – P. 14720–14727.
12. Ercolessi, F. Interatomic Potentials from First-Principles Calculations: the Force-Matching Method / F. Ercolessi, J.B. Adams // *Europhys. Lett.* – 1994. – V. 26. – P. 583–588.
13. Mendeleev, M.I. Determination of alloy interatomic potentials from liquid-state diffraction data / M.I. Mendeleev, D.J. Srolovitz // *Phys. Rev. B.* – 2002. – V. 66. – P. 1–9.
14. Белашенко, Д.К. Применение модели погруженного атома к жидким металлам. Жидкая ртуть / Д.К. Белашенко // *Теплофизика высоких температур.* – 2006. – Т. 44. – С. 1–44.
15. Waseda, Y. The Structure of Non-crystalline Materials, Liquid and Amorphous Solids / Y. Waseda. – McGraw-Hill, New York, 1980. – P. 324.

Поступила в редакцию 18 сентября 2007 г.

ИДЕНТИФИЦИРУЕМОСТЬ ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ПСЕВДООЖИЖЕННЫХ СЛОЕВ

И.В. Елюхина, Г.Ф. Кузнецов

Обсуждены вопросы, связанные с построением матрицы наблюдаемости для нелинейных систем и возникающие при обработке высокотемпературных установок, на примере топочных устройств с кипящим слоем.

При моделировании процессов в высокотемпературных реологически сложных (дисперсных и пр.) системах описание гидромеханики потока требуется дополнить учетом тепломассообменных свойств объекта, фазовых превращений в нем и пр. Так, при экспериментальной отработке топок с кипящим слоем по измерениям температуры и составу газовой фазы по высоте слоя определяются такие величины как эффективная энергия активации процесса горения E , относительный размер горячей частицы $1/\varphi$, коэффициент диффузии K . Для разрешимости задачи необходимо, чтобы между множеством измеряемых параметров и состояния, расширенным вектором оцениваемых характеристик, существовало взаимно однозначное соответствие [1].

Исследуем идентифицируемость математической модели (4.14 в [2]), включающей дифференциальные уравнения баланса окислителя в непрерывной и дискретной фазах и баланса энергии для оживающего агента и твердой фазы. В модели проведем учет неоднородности генерации тепла на поверхности частиц топлива и поглощения окислителя по высоте слоя y путем введения нелинейной функции: степенной, экспоненциальной и пр., одним из вариантов которой является зависимость с коэффициентами α_i ($i = 1 \dots 4$) как в [2]. Заметим, что чем большее число неизвестных параметров включает функция, тем с меньшей точностью они могут быть оценены из условия минимума критерия качества ввиду его овражности в пространстве этих величин и смещения минимума вдоль оси оврага при прочих равных условиях, но с другой стороны с широким набором характеристик функция более корректно аппроксимирует поведение системы. Выбор оптимального представления исходных и пр. данных входит в круг задач параметрической идентификации [1]. Проверим достаточные условия глобальной биективности отображений в терминах якобиевой матрицы. Математическую модель кипящего слоя представим в виде:

$$\begin{aligned} \frac{dU_1}{dy} &= U_2; \\ \frac{dU_2}{dy} &= \frac{1}{U_{10}\varepsilon_1} \left[\frac{1}{N-1} U_2 + \frac{\beta_1 \xi D}{U_9} (1 + U_{11}y + U_{12}y^2) U_1 + P\Pi(U_3 - U_1) \right]; \\ \frac{dU_3}{dy} &= -P\Pi(U_3 - U_1); \quad \frac{dU_4}{dy} = U_5; \\ \frac{dU_5}{dy} &= \frac{-qm\xi}{U_9} (1 + U_{13}y + U_{14}y^2) + \Phi B \frac{U_4}{U_9 U_{10}}; \\ \frac{dU_6}{dy} &= U_7; \quad \frac{dU_7}{dy} = -\Phi B \frac{U_6}{U_9 U_{10}}; \\ \frac{dU_8}{dy} &= 0; \quad \frac{dU_9}{dy} = 0; \quad \frac{dU_{10}}{dy} = 0; \quad \frac{dU_{11}}{dy} = 0; \quad \frac{dU_{12}}{dy} = 0; \quad \frac{dU_{13}}{dy} = 0; \quad \frac{dU_{14}}{dy} = 0. \end{aligned} \quad (1)$$

Краевые условия для системы (1):

$$\begin{aligned} y=0: \quad U_2 &= \frac{U_1 - C_0}{U_{10}(N-1)}; \quad U_3 = C_0 = 0,21; \quad U_5 = 0; \quad U_7 = 0; \\ y=1: \quad \frac{dU_1}{dy} &= U_2 = 0; \quad \frac{dU_4}{dy} = U_5 = -\frac{Pe}{U_{10}}; \quad \frac{dU_6}{dy} = U_7 = 0. \end{aligned} \quad (2)$$

В (1), (2) приняты следующие обозначения (см. также [2]):

$$U_1 = C; U_2 = \frac{dC}{dy}; U_3 = C_g; U_4 = \Theta_g; U_5 = \frac{d\Theta_g}{dy}; U_6 = \Theta; U_7 = \frac{d\Theta}{dy};$$

$$U_8 = E; U_9 = \frac{1}{\varphi}; U_{10} = K; U_{11} = \alpha_1; U_{12} = \alpha_2; U_{13} = \alpha_3; U_{14} = \alpha_4. \quad (3)$$

В системе (1) вектор состояния \mathbf{U} математической модели расширен включением вектора неизвестных параметров $U_8 - U_{14}$, благодаря чему задача идентифицируемости сведена к задаче наблюдаемости вектора начальных состояний системы (1). В краевых условиях (2) не определены начальные условия для $U_8 - U_{14}$, т.е. неизвестны семь условий для системы (1). Возможность оценивания неизвестных величин из измерений температуры Θ_g по высоте слоя определяется из анализа матрицы отображений \mathbf{J} [1], которая в настоящем случае в каждой строке содержит n элементов вида $\frac{\partial^{k-1}}{\partial x_j^{k-1}} \left(\frac{\partial \Theta_g}{\partial y} \right)$, где n – число неизвестных параметров x ($n=7$ – для модели (1)), k, j – номер строки и столбца ($\partial \Theta_g / \partial x_j$ – для первой строки).

Функции чувствительности в матрице находятся из решения системы уравнений для функций чувствительности с нулевыми начальными условиями [1]. Для определения системы уравнений для функций чувствительности следует продифференцировать систему (1) по неизвестным параметрам $\mathbf{x}(E, \varphi, K, \alpha_i)$ и сменить порядок дифференцирования в левой части уравнений. Далее исходная система уравнений (1) и система уравнений для функций чувствительности интегрировались совместно по высоте слоя y с шагом Δy , принятым постоянным в связи с необходимостью вычисления для остальных строк матрицы Якоби производных по y от функций чувствительности. Так, для функции чувствительности $\partial \Theta_g / \partial E$ можно записать систему уравнений:

$$\frac{d}{dy} \left(\frac{d\mathbf{U}}{dy} \right) = \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial E}, \quad (4)$$

где $\mathbf{U} = [U_1 \dots U_{14}]^T$; $\mathbf{f} = [f_1 \dots f_{14}]^T$ в системе $d\mathbf{U}/dy = \mathbf{f}(\mathbf{U}, \mathbf{x}, y)$, с нулевыми начальными условиями, которые получаются дифференцированием краевых условий системы (1) по E . Система уравнений чувствительности для $\partial \Theta_g / \partial E = \partial U_6 / \partial U_{8*}$, где U_{8*} – начальное значение U_8 , имеет следующий вид:

$$\frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_1}{\partial U_{8*}} \right) = \frac{\partial U_2}{\partial U_{8*}};$$

$$\frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_2}{\partial U_{8*}} \right) = \frac{-1}{U_{10}^2 \varepsilon_1} \left[\frac{1}{N-1} U_2 + \frac{\beta_1 \xi D}{U_9} (1 + U_{11}y + U_{12}y^2) U_1^2 + P\Pi(U_3 - U_1) \right] \times$$

$$\times \frac{\partial U_{10}}{\partial U_{8*}} + \frac{1}{U_{10}^2 \varepsilon_1} \left[\frac{1}{N-1} \frac{\partial U_1}{\partial U_{8*}} + \frac{\beta_1 D}{U_9} (1 + U_{11}y + U_{12}y^2) U_1 \frac{\partial \xi}{\partial E} - \frac{\beta_1 \xi D}{U_9^2} (1 + U_{11}y + U_{12}y^2) \times \right.$$

$$\left. \times U_1 \frac{\partial U_9}{\partial U_{8*}} + \frac{\beta_1 \xi D}{U_9} \left(y \frac{\partial U_{11}}{\partial U_{8*}} + y^2 \frac{\partial U_{12}}{\partial U_{8*}} \right) U_1 + \frac{\beta_1 \xi D}{U_9} (1 + U_{11}y + U_{12}y^2) \frac{\partial U_1}{\partial U_{8*}} + P\Pi \left(\frac{\partial U_3}{\partial U_{8*}} - \frac{\partial U_1}{\partial U_{8*}} \right) \right];$$

$$\frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_3}{\partial U_{8*}} \right) = -P\Pi \left(\frac{\partial U_3}{\partial U_{8*}} - \frac{\partial U_1}{\partial U_{8*}} \right); \quad \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_4}{\partial U_{8*}} \right) = \frac{\partial U_5}{\partial U_{8*}};$$

$$\frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_5}{\partial U_{8*}} \right) = -qm\xi \left(y \frac{\partial U_{13}}{\partial U_{8*}} + y^2 \frac{\partial U_{14}}{\partial U_{8*}} \right) - qm\xi (U_{13}y + U_{14}y^2) \frac{\partial \xi}{\partial U_{8*}} +$$

$$+ \Phi_B \frac{1}{U_9 U_{10}} \frac{\partial U_4}{\partial U_{8*}} - \Phi_B \frac{U_4}{U_9^2 U_{10}} \frac{\partial U_9}{\partial U_{8*}} - \Phi_B \frac{U_4}{U_9 U_{10}^2} \frac{\partial U_{10}}{\partial U_{8*}};$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_6}{\partial U_{8^*}} \right) &= \frac{\partial U_7}{\partial U_{8^*}}; \\ \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_7}{\partial U_{8^*}} \right) &= -\Phi B \frac{1}{U_9 U_{10}} \frac{\partial U_4}{\partial U_{8^*}} + \Phi B \frac{U_4}{U_9^2 U_{10}} \frac{\partial U_9}{\partial U_{8^*}} + \Phi B \frac{U_4}{U_9 U_{10}^2} \frac{\partial U_{10}}{\partial U_{8^*}}; \\ \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_8}{\partial U_{8^*}} \right) &= 0; \quad \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_9}{\partial U_{8^*}} \right) = 0; \quad \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_{10}}{\partial U_{8^*}} \right) = 0; \quad \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_{11}}{\partial U_{8^*}} \right) = 0; \\ \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_{12}}{\partial U_{8^*}} \right) &= 0; \quad \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_{13}}{\partial U_{8^*}} \right) = 0; \quad \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_{14}}{\partial U_{8^*}} \right) = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

Система уравнений (5) решается при граничных условиях:

$$\begin{aligned} y=0: \quad \frac{\partial U_3}{\partial U_{8^*}} &= 0; \quad \frac{\partial U_5}{\partial U_{8^*}} = 0; \quad \frac{\partial U_7}{\partial U_{8^*}} = 0; \quad \frac{\partial U_2}{\partial U_{8^*}} = \frac{1}{k(N-1)} \frac{\partial U_1}{\partial U_{8^*}}; \quad \frac{\partial U_8}{\partial U_{8^*}} = 1; \\ \frac{\partial U_9}{\partial U_{8^*}} &= 0; \quad \frac{\partial U_{10}}{\partial U_{8^*}} = 0; \quad \frac{\partial U_{11}}{\partial U_{8^*}} = 0; \quad \frac{\partial U_{12}}{\partial U_{8^*}} = 0; \quad \frac{\partial U_{13}}{\partial U_{8^*}} = 0; \quad \frac{\partial U_{14}}{\partial U_{8^*}} = 0. \end{aligned} \quad (6)$$

Рассмотрим вычисление элементов первого столбца матрицы наблюдаемости \mathbf{J} . Так, элемент $\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \Theta_g}{\partial E} \right) = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial U_6}{\partial U_{8^*}} \right)$ определяется разностным методом (например, для наглядности приведем схему с точностью $O(\Delta y^2)$):

$$\left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial U_6}{\partial U_{8^*}} \right) \right]_l = \frac{\left(\frac{\partial U_6}{\partial U_{8^*}} \right)_{l+1} - \left(\frac{\partial U_6}{\partial U_{8^*}} \right)_{l-1}}{2\Delta y} + O(\Delta y^2),$$

т.е. применяется простая алгебраическая операция над решениями системы (5). Следующие элементы первого столбца находятся аналогично, например, с точностью $O(\Delta y^2)$:

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial^2}{\partial y^2} \left(\frac{\partial U_6}{\partial U_{8^*}} \right) \right]_l &= \frac{\left(\frac{\partial U_6}{\partial U_{8^*}} \right)_{l+1} - 2 \left(\frac{\partial U_6}{\partial U_{8^*}} \right)_l + \left(\frac{\partial U_6}{\partial U_{8^*}} \right)_{l-1}}{\Delta y^2} + O(\Delta y^2); \\ \left[\frac{\partial^m}{\partial y^m} \left(\frac{\partial U_6}{\partial U_{8^*}} \right) \right]_l &= \frac{\frac{\partial^{m-1}}{\partial y^{m-1}} \left(\frac{\partial U_6}{\partial U_{8^*}} \right)_{l+1} - \frac{\partial^{m-1}}{\partial y^{m-1}} \left(\frac{\partial U_6}{\partial U_{8^*}} \right)_{l-1}}{2\Delta y} + O(\Delta y^2), \quad (l=3, \dots, 6). \end{aligned}$$

Система уравнений для определения элемента $\frac{\partial \Theta_g}{\partial \varphi} = \frac{\partial U_6}{\partial (1/U_{9^*})}$ имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_1}{\partial \varphi} \right) &= \frac{\partial U_2}{\partial \varphi}; \\ \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_2}{\partial \varphi} \right) &= \frac{-1}{U_{10}^2 \varepsilon_1} \left[\frac{1}{N-1} U_2 + \frac{\beta_1 \xi D}{U_9} (1 + U_{11} y + U_{12} y^2) U_1 + P\Pi (U_3 - U_1) \right] \times \\ &\times \frac{\partial U_{10}}{\partial \varphi} + \frac{-1}{U_{10} \varepsilon_1} \left[\frac{1}{N-1} \frac{\partial U_2}{\partial \varphi} + \beta_1 \xi D (1 + U_{11} y + U_{12} y^2) U_1 + \frac{\beta_1 \xi D}{U_9} \left(1 + \frac{\partial U_{11}}{\partial \varphi} y + \frac{\partial U_{12}}{\partial \varphi} y^2 \right) U_1 + \right. \\ &\left. + \frac{\beta_1 \xi D}{U_9} (1 + U_{11} y + U_{12} y^2) \frac{\partial U_1}{\partial \varphi} + P\Pi \left(\frac{\partial U_3}{\partial \varphi} - \frac{\partial U_1}{\partial \varphi} \right) \right]; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_3}{\partial \varphi} \right) &= -P\Pi \left(\frac{\partial U_3}{\partial \varphi} - \frac{\partial U_1}{\partial \varphi} \right); \quad \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_4}{\partial \varphi} \right) = \frac{\partial U_5}{\partial \varphi}; \\
\frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_5}{\partial \varphi} \right) &= -qm\xi \left(1 + U_{13}y + U_{14}y^2 \right) \frac{\partial \xi}{\partial \varphi} - qm\xi \left(y \frac{\partial U_{13}}{\partial \varphi} + y^2 \frac{\partial U_{14}}{\partial \varphi} \right) + \\
&+ \Phi_B \frac{1}{U_9 U_{10}} \frac{\partial U_4}{\partial \varphi} - \Phi_B \frac{U_4}{U_9^2 U_{10}} \frac{\partial U_9}{\partial \varphi} - \Phi_B \frac{U_4}{U_9 U_{10}^2} \frac{\partial U_{10}}{\partial \varphi}; \\
\frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_6}{\partial \varphi} \right) &= \frac{\partial U_7}{\partial \varphi}; \\
\frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_7}{\partial \varphi} \right) &= -\Phi_B \frac{1}{U_9 U_{10}} \frac{\partial U_4}{\partial \varphi} + \Phi_B \frac{U_4}{U_9^2 U_{10}} \frac{\partial U_9}{\partial \varphi} + \Phi_B \frac{U_4}{U_9 U_{10}^2} \frac{\partial U_{10}}{\partial \varphi}; \\
\frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_8}{\partial \varphi} \right) &= 0; \quad \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_9}{\partial \varphi} \right) = 0; \quad \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_{10}}{\partial \varphi} \right) = 0; \quad \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_{11}}{\partial \varphi} \right) = 0; \\
\frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_{12}}{\partial \varphi} \right) &= 0; \quad \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_{13}}{\partial \varphi} \right) = 0; \quad \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_{14}}{\partial \varphi} \right) = 0; \\
y=0: \quad \frac{\partial U_2}{\partial \varphi} &= \frac{1}{k(N-1)} \frac{\partial U_1}{\partial \varphi}; \quad \frac{\partial U_3}{\partial \varphi} = 0; \quad \frac{\partial U_5}{\partial \varphi} = 0; \quad \frac{\partial U_7}{\partial \varphi} = 0; \\
\frac{\partial U_8}{\partial \varphi} &= 0; \quad \frac{\partial U_9}{\partial \varphi} = -\frac{1}{\varphi^2}; \quad \frac{\partial U_i}{\partial \varphi} = 0, \quad (i=10, \dots, 14); \\
y=1: \quad \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_1}{\partial \varphi} \right) &= 0; \quad \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_4}{\partial \varphi} \right) = 0; \quad \frac{d}{dy} \left(\frac{\partial U_6}{\partial \varphi} \right) = 0. \tag{7}
\end{aligned}$$

Остальные элементы второго столбца матрицы вычисляются разностным методом аналогично элементам первого столбца. Системы уравнений для функций чувствительности $\partial \Theta_g / \partial K$, $\partial \Theta_g / \partial \alpha_i$ ($i=1, \dots, 4$) получаются аналогично. Функции U_i ($i=1, \dots, 14$), входящие в систему уравнений (4), определяются из решения системы (1).

В терминах Якобиана для рассматриваемого процесса [2] установлены локальная и глобальная идентифицируемость [1] системы по эмпирическим данным и пригодность модели для описания рабочих процессов в высокотемпературном псевдооживленном слое. При наличии в модели четырех параметров, описывающих нелинейности по высоте слоя, α_i ($i=1 \dots 4$) при различных видах задаваемых функций ранг матрицы \mathbf{J} был равен 7 и она являлась P -матрицей. Подобный анализ важен, прежде всего, при слабой наблюдаемости исследуемых эффектов и свойств и предпочтительно его обязательное применение, особенно в многопараметрических задачах. Построенные функции чувствительности используются в дальнейшем при нахождении ковариационной матрицы ошибок оцениваемых параметров по матрице ошибок измерения, изучении точности математической модели и оптимальном планировании эксперимента.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ–Урал (№ 07-02-96016).

Литература

1. Вяткин, Г.П. Разработка методов параметрической идентификации сред Оствальда–Вейля по результатам вибрационной реометрии / Г.П. Вяткин, И.В. Елюхина // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2004. – № 8 (37). – С. 22–27.
2. Кузнецов, Г.Ф. Физико-химические процессы и технология газификации при сжигании твердых топлив / Г.Ф. Кузнецов. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2002. – 174 с.

Поступила 17 сентября 2007 г.

ДИНАМИЧЕСКАЯ И ФИЗИЧЕСКАЯ ЭВОЛЮЦИЯ КОМЕТ: ДОЛЯ АСТЕРОИДОВ, СБЛИЖАЮЩИХСЯ С ЗЕМЛЕЙ, КОМЕТНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

Д.Ф. Лупишко, В.В. Емельяненко, Е.Е. Бирюков

Работа посвящена фундаментальной проблеме современной астрономии: выявлению физических свойств, характерных для комет и кометных астероидов. Получено, что доля кометных астероидов составляет $(10 \pm 5) \%$ от общего количества астероидов, сближающихся с Землей (АСЗ).

Введение

Еще не так давно кометы и астероиды рассматривались как совершенно разные популяции малых тел в Солнечной системе. Однако в последнее десятилетие появляется все больше наблюдательных данных и результатов численного моделирования, которые свидетельствуют о тесных взаимосвязях между кометами и астероидами. Это – обнаружение астероидов, сближающихся с Землей (АСЗ), находящихся на кометоподобных орбитах ($Q \geq 4,5$ а.е.); сходство некоторых физических и оптических свойств (альbedo, цвет, поляризационные характеристики, форма, скорость вращения и др.) кометных ядер с низкоальbedными астероидами; обнаружение кометоподобной активности ряда астероидов [1]. Более глубокое понимание этих связей, а также процессов динамической и физической эволюции комет в «кометные астероиды», представляет интерес не только с точки зрения космогонических проблем малых тел Солнечной системы, т.е., фундаментальной науки, но и с точки зрения прикладной – проблема астероидно-кометной опасности, наличие водяного льда на астероидах и т.п.

Идея о возможном существовании среди АСЗ ядер потухших комет (т.е., исчерпавших свою активность) была высказана Эпиком еще в 1963 г. [2]. В настоящее время таких переходных между кометами и астероидами объектов (comet-asteroid transition objects), которые периодически проявляют признаки кометной активности, известно несколько (см., напр., [3]). Это – 7968 Elst-Pizarro = 133P/E-P в главном поясе, 4015 Wilson-Harrington = 107P/W-H среди АСЗ, C/2001 OG108 среди Дамоклоидов и другие. Динамическая эволюция (т.е., эволюция орбиты) таких объектов изучена больше, чем физическая (см., напр., [4]).

Основным механизмом пополнения популяции АСЗ является так называемый, резонансный механизм, когда астероид главного пояса или его фрагмент размером $D < 20$ км, образовавшийся в результате катастрофического разрушения родительского тела, под действием эффекта Ярковского попадает в зону резонанса среднего движения с Юпитером 3:1 (или векового резонанса ν_6), где испытывает хаотическое возрастание эксцентриситета, в результате его орбита эволюционирует так, что с течением времени начинает пересекать орбиты планет земной группы. Как показывают оценки, главный пояс астероидов является основным источником пополнения и поддержания АСЗ-популяции в стабильном состоянии.

Возникает естественный вопрос, а какова же доля АСЗ кометного происхождения? Оценки, полученные в прошлом веке (до 2000 г.), содержали практически весь спектр возможных значений. Так, Эпик [2] считал, что большинство из этих объектов как раз являются ядрами потухших комет. Б.Ю. Левин и А.Н. Симоненко (Москва) в 1981 г. возражали против кометной природы большинства АСЗ, поскольку последние являются родительскими телами метеоритов, которые не могли сформироваться в ядрах комет. Г. Везерилл в США оценил долю АСЗ кометного происхождения в 40 % (1988 г.), а Р. Бинзел и др. в 1992 г. заключили ее в пределы от нуля до 40 %. В то же время, Э. Тедеско и Дж. Градье в 1987 г. считали, что если кометные ядра и встречаются среди АСЗ, то крайне редко (ссылки на эти оценки содержатся в статье [5]).

Накопление большего количества данных о физических и орбитальных свойствах АСЗ и комет, безусловно, способствовало более точным оценкам доли кометных ядер среди астероидов, сближающихся с Землей, появившихся в 2001 г. и позже.

Физические характеристики комет и астероидов

Как известно, кандидаты на кометное происхождение должны, как правило, удовлетворять следующим требованиям: а) это должны быть низкоальбедные астероиды D-, P- и C-типов, содержащие наиболее примитивное вещество, которое широко представлено во внешней части пояса астероидов и на его периферии (группы Кибелы, Гильды, Троянцев); б) они должны иметь более медленное осевое вращение по сравнению со средним значением, характерным для АСЗ, и в среднем, более вытянутую форму; с) они также должны находиться на кометных орбитах и быть связанными с метеорными потоками. Луишко и Луишко [5] провели сравнительный анализ физических свойств и типов минералогии АСЗ, астероидов главного пояса и, частично, ядер комет, а также данных о возможной связи АСЗ с метеорными потоками и пришли к заключению, что основным источником пополнения астероидов групп Амура, Аполлона и Атона является главный пояс астероидов, а доля АСЗ кометного происхождения не превышает 10 %.

Определению и анализу геометрических альбедо и размеров АСЗ на кометоподобных орбитах посвящена статья [6]. Построенная авторами зависимость альбедо АСЗ и комет от величины их постоянной Тиссерана показывает резкий разрыв в точке $T = 3$. В левой части зависимости ($T < 3$) оказались кометы и 9 из 10-ти низкоальбедных астероидов. В правой части ($T > 3$) сосредоточены средне- и высокоальбедные АСЗ (35 объектов). Среднее альбедо для этих двух групп объектов составляет:

$$0,038 \pm 0,043 \text{ для } T \leq 3, \text{ и} \\ 0,215 \pm 0,147 \text{ для } T > 3.$$

На основании этих данных авторы делают вывод о том, что доля АСЗ кометного происхождения является значительной и составляет, по крайней мере, 9 %.

В этом же 2001 г. была получена еще одна оценка [7]. Анализируя относительное количество низкоальбедных объектов, обнаруженных к тому времени среди АСЗ и учитывая влияние наблюдательной селекции, автор оценивает долю кометных ядер в популяции АСЗ величиной порядка 5 %.

Предполагая пять основных областей, которые могут быть источниками АСЗ, в работе [8] была построена динамическая модель, которая с учетом эффектов селекции хорошо описывает распределение орбит и абсолютных звездных величин (до $H = 22^m$) популяции АСЗ. При этом долгопериодические кометы и кометы галлеевского типа, как источники АСЗ, не рассматривались. Результаты моделирования показали, что группы Амура, Аполлона и Атона содержат 32 ± 1 %, 62 ± 1 % и 6 ± 1 % объектов АСЗ популяции, соответственно. При этом, ~ 61 % АСЗ приходят из внутренней части главного пояса ($a < 2,5$ а.е.), ~ 24 % – из центральной ($2,5 < a < 2,8$ а.е.), ~ 8 % – из внешней ($a > 2,8$ а.е.) и 6 % – из комет семейства Юпитера [4, 8].

Еще одна оценка получена в работе [9]. Авторы проанализировали спектральные свойства АСЗ разных типов и оценили распределение типов с учетом эффектов наблюдательной селекции. При этом они использовали только два критерия, характеризующих кометную природу АСЗ, это – постоянная Тиссерана ($T < 3$) и соответствие спектра C, D или P-типу астероидов. Они пришли к выводу, что доля ядер потухших комет среди АСЗ составляет 10–18 %.

Астероиды и кометы на орбитах галлеевского типа

Другой аспект проблемы кометных астероидов заключается в определении источника их происхождения. Поскольку кометные астероиды – кометы, исчерпавшие кометную активность, источник у кометных астероидов и комет должен быть один.

Особый интерес представляют астероиды и кометы на орбитах галлеевского типа. Эти тела движутся на орбитах с параметром Тиссерана $T < 2$ и периодом обращения вокруг Солнца $20 < P < 200$ лет. Поскольку эти объекты движутся по сильно наклоненным и обратным орбитам, их источником может быть только почти изотропное сферическое облако Оорта [10–12]. В работе [13] на основании фотометрических наблюдений отмечалось, что дамоклоиды не могут происходить из пояса Эджеворта–Койпера, следовательно их источник – облако Оорта. Сравнительный анализ физических свойств галлеевских астероидов и комет может дать информацию о физических изменениях кометных ядер при их угасании. Применительно к кометам семейства Юпитера (КСЮ) подобный анализ провести трудно, поскольку источником КСЮ может быть как пояс Эджеворта–Койпера [14, 15], так и облако Оорта [12, 16, 17]. Однако проведение такого анализа осложня-

ется малым число обнаруженных дамоклоидов (около 35 с переигелийным расстоянием $q < 5$ а.е.) и их большим периодом обращения вокруг Солнца. Мы рассмотрели угасание и разрушение ядер комет галлеевского типа, захваченных из облака Оорта. Нами было получено, что на орбитах галлеевского типа должно существовать ~ 10 дамоклоидов, пересекающих орбиту Земли. Следовательно малое число обнаруженных дамоклоидов объясняется не эффектами наблюдательной селекции, а результатом физических процессов в ядрах комет, в результате чего на орбитах с $q < 1$ а.е. количество активных КГТ и дамоклоидов сопоставимо.

Заключение

Таким образом, можно подытожить, что последние оценки доли астероидов кометного происхождения, которые могут сближаться и пересекать орбиту Земли, в среднем согласуются с величиной 10 ± 5 %. Представляется, что эта величина может существенно зависеть от диапазона размеров АСЗ. А это очень важно с точки зрения проблемы астероидно-кометной опасности: либо объект, который находится на трассе сближения с Землей и угрожает возможным столкновением, является фрагментом астероида главного пояса с объемной плотностью $2 \div 6$ г/см³, либо же это ядро потухшей кометы со средней плотностью $\sim 0,5$ г/см³, которое претерпит сильную фрагментацию и испарение при входе в плотные слои земной атмосферы. Если принять во внимание, что источником АСЗ кометного происхождения могут быть разные динамические группы комет, то надо учитывать и такой фактор как связь физических характеристик комет (состав) с местами их образования и/или эволюцией [18, 19]. Для распознавания таких объектов и для более надежной оценки их относительного количества необходимо знать и уметь определять характерные для них физические характеристики. Такие исследования представляются в настоящее время исключительно актуальными.

Следует особо выделять исследование комет галлеевского типа и дамоклоидов, поскольку только для этих объектов облако Оорта является основным источником пополнения. Из анализа физических характеристик КГТ и дамоклоидов можно выделить особенности, характерные для объектов из облака Оорта. Благодаря чему можем определить, какова доля комет семейства Юпитера из облака Оорта и пояса Эджеворта-Койпера. Что в свою очередь даст нам ключ к пониманию всей структуры внешней части Солнечной системы: пояс Эджеворта-Койпера, диск рассеянных объектов, внутреннее и внешнее составляющие облака Оорта.

Емельяненко В.В. и Бирюков Е.Е. благодарят РФФИ (грант № 06-02-16512) за поддержку.

Литература

1. Hsieh, H.H. 2006. Active asteroids: mystery in the Main Belt / H.H. Hsieh, D. Jewitt // *Proceed. of IAU Symp. 229: Asteroids, Comets, Meteors. Aug. 7 – 12, 2005. Búzios, Rio de Janeiro, Brazil. Cambridge Univ. Press.* – P. 425–437.
2. Öpik, E.J. The stray bodies in the solar system. Part I. Survival of cometary nuclei and the asteroids / E.J. Öpik // *Adv. Astron. Astrophys.* – 1963. – V. 2. – P. 219–262.
3. Toth, I. Connection between asteroids and cometary nuclei / I. Toth // *Proceed. of IAU Symp. 229: Asteroids, Comets, Meteors. Aug. 7 – 12, 2005. Búzios, Rio de Janeiro, Brazil. Cambridge Univ. Press.* – P. 67–96.
4. The effect of Yarkovsky thermal forces on the dynamical evolution of asteroids and meteoroids / W.F. Bottke, D. Vokrouhlichy, D.P. Rubincam, M. Broz // *In: ASTEROIDS III. Eds. R.P. Binzel et al. Univ. of Arizona Press, Tucson (USA).* – 2002. – P. 395–408.
5. Лупишко, Д.Ф. Об источниках происхождения астероидов, сближающихся с Землей / Д.Ф. Лупишко, Т.А. Лупишко // *Астрон. Вестник.* – 2001. – Т. 35, № 3. – С. 250–256.
6. Fernandez, Ya.R. Low albedos among extinct comet candidates / Ya.R. Fernandez, D.C. Jewitt, S.S. Sheppard // *Astrophys. J.* – 2001. – V. 553. – P. L197–L200.
7. Whiteley, R.J. A compositional and dynamical survey of the near-Earth asteroids / R.J. Whiteley // *PhD. thesis, University of Hawaii.* – 2001. – 189 p.
8. Bottke, W.F.Jr. Debaised orbital and absolute magnitude distribution of the near-Earth objects / W.F.Jr. Bottke, A. Morbidelli, R. Jedicke, *et al.* // *Icarus.* 2002. – V. 156, № 2. – P. 399–433.

9. Binzel, R.P. Observed spectral properties of near-Earth asteroids: results from population distribution, source regions, and space weathering processes / R.P. Binzel, A.S. Rivkin, J.S. Scott *et al.* // *Icarus*. – 2004. – V. 170, № 2. – P. 259–294.
10. Emel'yanenko, V.V. Capture of Halley-type comets from the near-parabolic flux / V.V. Emel'yanenko, M.E. Bailey // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* – 1998. – V. 298. – P. 212–222.
11. Emel'yanenko, V.V. From the Solar system comet cloud to near-Earth space / V.V. Emel'yanenko // *Evolution and Source Regions of Asteroids and Comets* // *Proc. IAU Coll. 173*. Eds.: J. Svoren, E.M. Pettich, and H. Rickman, *Astron. Inst. Slovak Acad. Sci., Tatranska Lomnica*. – 1999. – P. 339–344.
12. Бирюков, Е.Е. Захват комет из облака Оорта на орбиты галлеевского типа и орбиты семейства Юпитера / Е.Е. Бирюков // *Астрон. Вестник*. – 2007. – Т. 41, № 3. – С. 232–240.
13. Jewitt D. A first look at the damocloids / D. Jewitt // *Astron. J.* – 2005. – V. 129. – P. 530–538.
14. Morbidelli, A. An overview on the Kuiper belt and on the origin of Jupiter-family comets / A. Morbidelli // *Celestial Mechanics and Dynamical Astronomy*. – 1999. – V. 72. – P. 129–156.
15. Fernandez, J.A. Are there many inactive Jupiter-Family Comets among the Near-Earth asteroid population? / J.A. Fernandez, T. Gallardo, A.N. Brunini // *Icarus*. – 2002. – V. 159. – P. 358–368.
16. Emel'yanenko, V.V. Structure and Dynamics of the Centaur Population: Constraints on the Origin of Short-Period Comets / V.V. Emel'yanenko // *Earth, Moon, and Planets*. – 2006. – V. 97. – P. 341–351.
17. Fernandez J.A. The transfer of comets from parabolic orbits to short-period orbits: Numerical studies / J.A. Fernandez, T. Galardo // *Astron. And Astrophys.* – 1994. – 281. – P. 911–922.
18. A'Hearn, M.F. The ensemble properties of comets: Results from narrowband photometry of 85 comets, 1976–1992 / M.F. A'Hearn, R.L. Millis, D.J. Schleicher, *et al.* // *Icarus*. 1995. – V. 118. – P. 223–270.
19. Schleicher, D.G. Comet taxonomy and evolution / D.G. Schleicher // *Asteroids, Comets, Meteors 1993* // Eds: A. Milani, M. Di Martino, A. Cellino. – Dordrecht (Germany): Kluwer Acad. Publ. – 1994. – P. 415–428.

Поступила в редакцию 17 сентября 2007 г.

ПОСТОЯННАЯ ХОЛЛА В ТОНКИХ ПЛЕНКАХ ГЦК МЕТАЛЛОВ

А.А. Соловьев, В.М. Березин, М.А. Ермакова

Экспериментально исследован эффект Холла в тонкопленочных образцах ГЦК металлов, полученных методом термовакуумного напыления через маску на поликорковых подложках. Обнаружено расхождение постоянной Холла с расчетными из модели свободных электронов в пленках серебра.

Эффект Холла в тонких пленках может использоваться при создании микросенсорных электронных устройств, а также как метод контроля технологических процессов производства микро- и нанoeлектронных приборов. В виду малой толщины пленочного образца, величина ЭДС Холла может достигать достаточно больших величин в металлических образцах, изготовление которых технологически проще, чем полупроводниковых.

Применение методов неразрушающего контроля толщины формируемых пленочных структур, их электронно-кинетических характеристик имеет большое значение в технологиях микро и нанoeлектронике. Одним из таких удобных и дешевых методов может быть метод эффекта Холла. Этот метод позволяет легко определить величину подвижности электронных (дырочных) носителей тока. Оценки величины ЭДС Холла в металлической пленке толщиной 0,1 мкм, по известной эмпирической формуле, дают значение ~1 мВ. Однако это формула получена для объемных образцов и не учитывает возможное влияние подложки на формирование ЭДС Холла.

В работе приводятся экспериментальные результаты измерения ЭДС Холла в тонкопленочных металлических образцах, сформированных на поликорковых подложках методом фотолитографии. Образцы имели форму прямоугольников с длиной $a = 48$ мм, шириной $b = 10$ мм.

Схема экспериментальной установки предоставлена на рис. 1.

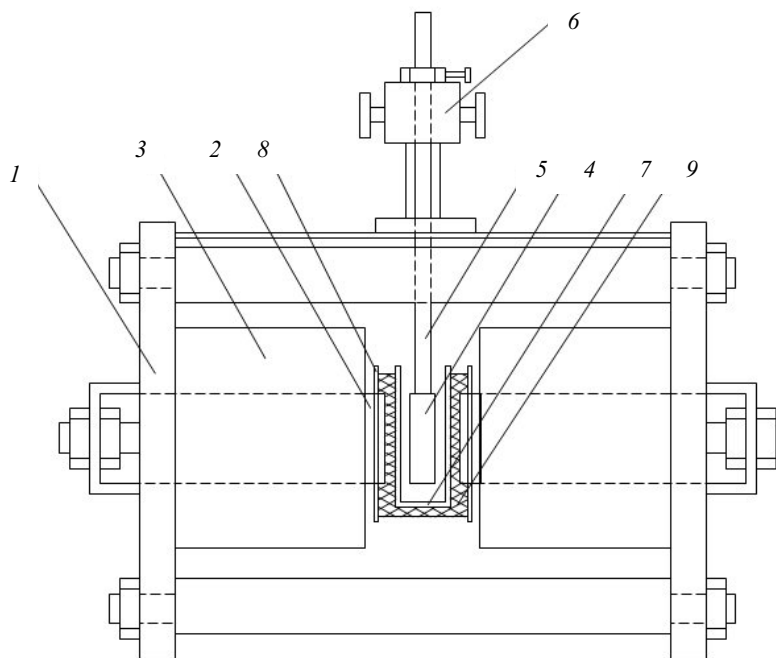


Рис. 1. Схема экспериментальной установки
 1 – каркас электромагнита; 2 – сердечник; 3 – обмотка; 4 – кювета для образца;
 5 – держатель кюветы; 6 – регулятор положения кюветы; 7 – дюар;
 8 – каркас для дюара; 9 – полиуретановая монтажная пена

Напряжение Холла измерялось с помощью микровольтметра с нижним пределом измерения 10 мкВ на постоянном токе. Ток через образец обеспечивался химическим источником.

Напряжение эквипотенциальности учитывалось путем изменения направления течения тока через образец. Линейная зависимость измеряемых напряжений между холловскими контактами для измеряемых образцов от индукции магнитного поля соответствует эффекту Холла (рис. 2–4).

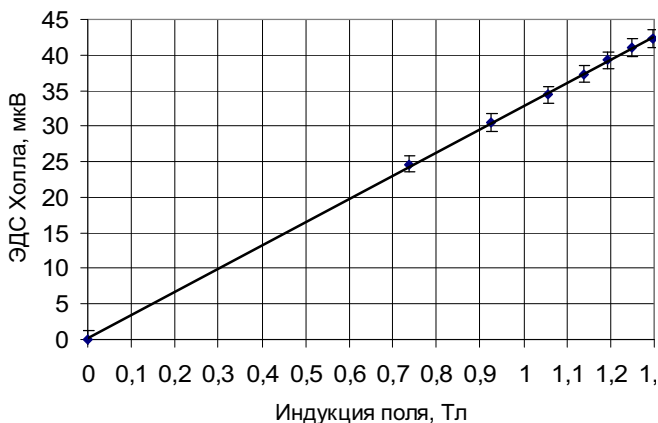


Рис. 2. Зависимость ЭДС Холла от индукции поля (образец меди)

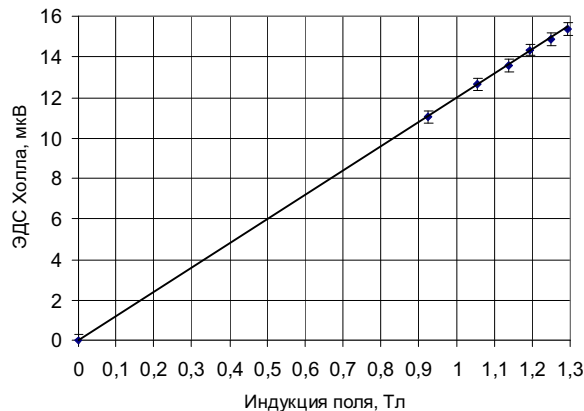


Рис. 3. Зависимость ЭДС Холла от индукции поля (образец алюминия)

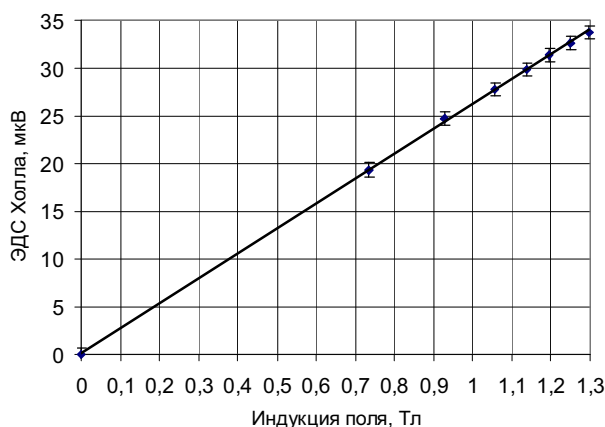


Рис. 4. Зависимость ЭДС Холла от индукции поля (образец серебра)

Величина расчетной постоянной Холла R_x определяется из формулы (1)

$$R_m = \frac{1}{en}, \quad (1)$$

где n – концентрацию носителей тока для исследуемого материала; и является отражением теории свободных электронов.

Формула

$$R_3 = \frac{\varepsilon_x d}{IB} \quad (2)$$

– позволяет рассчитать величину постоянной Холла, опираясь на экспериментальные значения, полученные в ходе исследования и, таким образом, подтвердить или опровергнуть достоверность данных о величине постоянной Холла, рассчитанной на основе теории свободных электронов. Табл. 1 содержит данные о величине постоянной Холла рассчитанные по формуле (1).

Геометрическая толщина образца – d , определялась с помощью зондового сканирующего микроскопа Solver Pro по результатам сканирования края пленки.

Таблица 1

Значение постоянной Холла (теория свободных электронов)			
Металл	Cu	Al	Ag
Постоянная Холла $R_H, 10^{-10} \text{ м}^3/\text{Кл}$	-7,39	-3,45	-10,67

Здесь и далее знак минус говорит о наличии электронной проводимости в металле.

В табл. 2 приведены данные зависимости постоянной Холла от индукции магнитного поля, рассчитанные по формуле (2).

Таблица 2

Индукция магнитного поля, Тл	Зависимость постоянной Холла от индукции магнитного поля		
	Постоянная Холла $R_H, 10^{-10} \text{ м}^3/\text{Кл}$		
	Cu	Al	Ag
0,000	–	–	–
0,736	-7,55	–	-3,69
0,926	-7,39	-3,28	-3,73
1,055	-7,34	-3,29	-3,68
1,138	-7,37	-3,29	-3,67
1,194	-7,39	-3,30	-3,68
1,249	-7,39	-3,28	-3,66
1,295	-7,35	-3,27	-3,65

Табл. 3 содержит среднее значение постоянной Холла, полученное в ходе эксперимента для каждого образца.

Таблица 3

Среднее значение постоянной Холла (эксперимент)			
Металл	Cu	Al	Ag
Постоянная Холла $R_H, 10^{-10} \text{ м}^3/\text{Кл}$	-7,37	-3,29	-3,68

Табл. 4 отражает величину среднеквадратичного отклонения, с которым получено экспериментальное значение постоянной Холла.

Таблица 4

Среднеквадратичное отклонение постоянной Холла			
Металл	Cu	Al	Ag
Погрешность $\Delta R_H, 10^{-10} \text{ м}^3/\text{Кл}$	0,48	0,15	0,26

Таким образом, в рамках данной работы, был произведен расчет величин R_m и R_s с учетом погрешностей. Полученные результаты сведены в таблицу 5, также там отражены данные для R_m и R_s , для сравнения, приведенные из источника [4], где постоянная Холла была измерена для пленок ряда металлов, в том числе и использованных в настоящей работе, при комнатных температурах.

Таблица 5

Металл	Сводная таблица для постоянной Холла			
	Постоянная Холла $R_H, 10^{-10} \text{ м}^3/\text{Кл}$			
	Теория свободных электронов		Эксперимент	
	Настоящая работа	Источник [2]	Настоящая работа	Источник [2]
Cu	-7,39	-7,4	-7,37	-5,6
Al	-3,45	-3,4	-3,29	-3,0
Ag	-10,67	-10,4	-3,68	-8,4

Выводы и обсуждение

Несовпадение измеряемой и расчетной из модели свободных электронов постоянных Холла для пленок серебра может быть связано со следующими обстоятельствами. Как показали исследования на зондовом сканирующем микроскопе, пленки серебра имеют существенно большую шероховатость и столбчатую микроструктуру. Кроме того, эта пленка имела меньшую геометрическую толщину (140 нм) по сравнению с пленками меди и алюминия используемыми в эксперименте. Это может служить дополнительным фактором уменьшения эффективной толщины пленки за счет поверхностных эффектов, прежде всего, на границе с подложкой. Оба приведенных фактора приводят к занижению экспериментально определенной по формуле (2) постоянной Холла, т.к. в этой формуле фигурирует геометрическая толщина d .

Литература

1. Кучис, Е.В. Гальваномагнитные эффекты и методы их исследования / Е.В. Кучис. – М.: Радио и связь, 1990 – 264 с.
2. Leonard, W.F. / W.F. Leonard, S.F. Lin // J. Appl. Phys. – 1970. – С. 41.
3. Чопра, К.Л. Электрические явления в тонких пленках / К.Л. Чопра, под ред. Т.Д. Шермергора. – М.: Мир, 1972 – 425 с.
4. Особенности наноструктуры и удельной проводимости тонких пленок различных металлов / И.В. Антонец, Л.Н. Котов, С.В. Некипелов, Е.А. Голубев // Журнал технической физики. – 2004. – Т. 74. – Вып. 3. – С. 24–27.
5. Быков, Ю.А. О некоторых особенностях структуры и свойств металлических «тонких» пленок / Ю.А. Быков, С.Д. Карпухин, Е.И. Газукина // МиТОМ. – 2000. – № 6. – С. 45–47.

*Поступила в редакцию 20 сентября 2007 г.
Представлена в окончательном виде 1 октября 2007 г.*

МАССОПЕРЕНОС ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ МЕЛКОДИСПЕРСНЫХ ОКСИДОВ $\text{TiO}_2 - \text{Cr}_2\text{O}_3$

Е.А. Белая, В.В. Викторов

Методом магнетохимического анализа исследован массоперенос при окислении Cr_2O_3 в системе мелкодисперсных оксидов $\text{TiO}_2 - \text{Cr}_2\text{O}_3$ на воздухе в интервале температур 800–1000 °С. Показано, что в процессе взаимодействия окисляется до 10 атомных слоев оксида хрома. Установлено, что массоперенос носит стохастический, ступенчатый характер.

Мелкодисперсные системы (МДС) с размером частиц от нескольких сотен единиц до сотен нанометров по сравнению с монолитными аналогичными объектами обладают специфическими, а в ряде случаев уникальными физико-химическими свойствами. Типичными представителями МДС являются мелкодисперсные оксиды *p*- и *3d*- металлов, которые широко используются в качестве неорганических пигментов, катализаторов химических реакций, магнитных порошков, компонентов для получения пластмасс, керамики и др. Примером таких мелкодисперсных оксидов является система $\text{TiO}_2 - \text{Cr}_2\text{O}_3$, которая представляет интерес для технологии получения полупроводниковой керамики, огнеупорных изделий, а также как составная часть многокомпонентных систем. Исходные оксиды независимо от условий получения и назначения продукта синтеза чаще всего используются в мелкодисперсном состоянии. Оксиды TiO_2 и Cr_2O_3 в мелкодисперсном состоянии обладают рядом уникальных физико-химических свойств, обусловленных их сильно развитой поверхностью и специфическим состоянием приповерхностного слоя кристалликов. В связи с этим исследованию процессов, которые развиваются при взаимодействии мелкодисперсных кристалликов, уделяется большое внимание [1–3].

На практике, как правило, приходится иметь дело с механической смесью мелкодисперсных оксидов TiO_2 и Cr_2O_3 , а их совместный нагрев при высоких температурах является необходимым этапом во многих технологических процессах. Ранее показано [4–7], что совместный нагрев на воздухе Cr_2O_3 с TiO_2 или Al_2O_3 приводит к окислению ионов Cr^{3+} до Cr^{6+} , что противоречит литературным данным по термической стабильности Cr_2O_3 . При этом наиболее интенсивное окисление происходит с анатазной модификацией диоксида титана [4, 5]. До настоящего времени не существует единого мнения, о причинах окисления Cr^{3+} до Cr^{6+} в мелкодисперсной системе $\text{TiO}_2 - \text{Cr}_2\text{O}_3$. Вопрос о механизме окисления Cr_2O_3 в системе также остается открытым.

Целью настоящей работы является исследование кинетики массопереноса при взаимодействии мелкодисперсных оксидов TiO_2 и Cr_2O_3 во время их совместного прокаливании на воздухе при температурах 800–1000 °С.

Экспериментальная часть

Исходными препаратами для исследования взяты TiO_2 марки х.ч. и Cr_2O_3 марки ч.д.а. Фазовый состав и размер кристалликов, рассчитанный по ширине рентгеновских дифракционных максимумов, следующие: для $\alpha\text{-Cr}_2\text{O}_3$ $d \approx 700 \text{ \AA}$; для TiO_2 анатазной модификации $d \approx 200 \text{ \AA}$. Удельная поверхность оксидов для $\alpha\text{-Cr}_2\text{O}_3$ равна $16 \text{ м}^2/\text{г}$, для анатаза $29 \text{ м}^2/\text{г}$.

В порошок TiO_2 добавляли Cr_2O_3 и перемешивали в бюксах на валках, что позволило сохранить исходную дисперсность и не нарушить состояния поверхности кристалликов в результате механического воздействия. Кинетику массопереноса в период взаимодействия TiO_2 и Cr_2O_3 при их совместном прокаливании на воздухе, исследовали методом магнетохимического анализа на образце состава 95 мас.% TiO_2 и 5 мас.% Cr_2O_3 .

Величину магнитной восприимчивости образцов, также как и в [7, 8], измеряли по методу Фарадея. Относительная систематическая ошибка при измерении χ не превышала 2 %. Нагрев

образцов в процессе исследования кинетики массопереноса осуществляли с помощью микропечи, вмонтированной между полюсными наконечниками электромагнита. Колебания температуры в зоне реакции не превышали ± 1 °С.

Обсуждение результатов

На рис. 1 представлены зависимости магнитной восприимчивости смеси 95 мас.% TiO_2 – 5 мас.% Cr_2O_3 от времени изотермической выдержки. Отличительной особенностью в ходе наблюдаемых кинетических зависимостей $\chi = f(\tau)$ является ступенчатость процесса взаимодействия оксидов. Магнитная восприимчивость в процессе выдержки уменьшается, что указывает на окисление Cr^{3+} до Cr^{6+} .

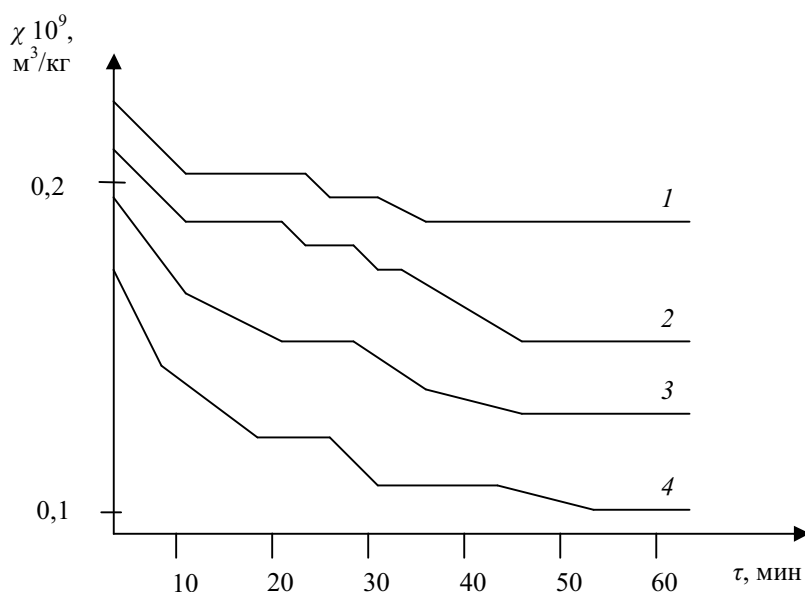


Рис. 1. Зависимости магнитной восприимчивости смеси $TiO_2-Cr_2O_3$ от времени изотермической выдержки:
1 – 800 °С, 2 – 850 °С, 3 – 900 °С, 4 – 1000 °С

В процессе взаимодействия наблюдаются квазиравновесные состояния, длительность которых зависит от температуры изотермической выдержки.

За параметр, описывающий количественные изменения при взаимодействии оксидов, принимали величину α , определяемую из равенства (1).

$$\alpha = \frac{\chi_0 - \chi_\tau}{\chi_0 - \chi_{X,p}}, \quad (1)$$

где χ_0 , χ_τ , $\chi_{X,p}$ – соответственно величины магнитной восприимчивости в начале процесса, в период отсчета времени и в момент достижения химического равновесия между реагирующими оксидами. Если считать, что зависимость магнитной восприимчивости от температуры описывается законом Кюри–Вейса, а постоянная Вейса в процессе взаимодействия меняется незначительно, равенство (1) можно преобразовать к виду

$$\alpha = \frac{N_{\tau Cr^{6+}}}{N_{X,p Cr^{6+}}}, \quad (2)$$

где $N_{\tau Cr^{6+}}$ – число ионов Cr^{6+} , образующихся к моменту времени τ ; $N_{X,p Cr^{6+}}$ – число ионов Cr^{6+} , образующихся в момент достижения химического равновесия между реагирующими оксидами. Таким образом, величину α можно рассматривать как параметр, характеризующий число ионов Cr^{3+} , превращающихся в Cr^{6+} при взаимодействии оксидов.

В период окисления Cr_2O_3 в системе $\text{TiO}_2\text{-Cr}_2\text{O}_3$ состояние поверхностного слоя кристалликов Cr_2O_3 характеризуется величиной коэффициента перекрытия, определяемого из равенства

$$P_{\text{Cr}} = \frac{N_{\tau \text{Cr}^{6+}}}{N_{\text{SCr}}} \quad (3)$$

Здесь N_{SCr} – количество ионов Cr^{3+} на поверхности кристалликов Cr_2O_3 . Число ионов $N_{\tau \text{Cr}^{6+}}$ определяли из равенства (2).

Таким образом, коэффициент перекрытия P_{Cr} показывает количество поверхностных монослоев Cr_2O_3 , окисленных в результате взаимодействия с TiO_2 .

На рис. 2 представлены зависимости коэффициента перекрытия P_{Cr} от времени изотермической выдержки смеси $\text{TiO}_2\text{-Cr}_2\text{O}_3$ на воздухе при температурах 800–1000 °С.

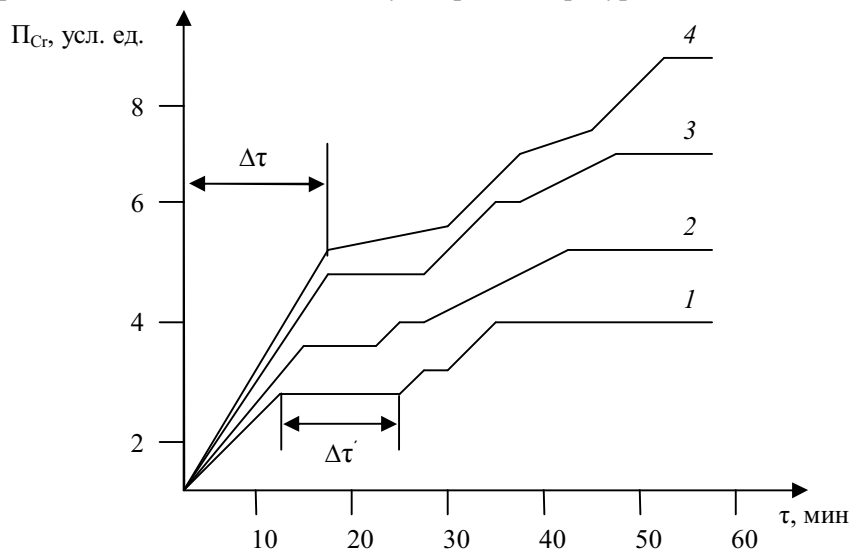


Рис. 2. Зависимость коэффициента перекрытия P_{Cr} от времени изотермической выдержки смеси $\text{TiO}_2\text{-Cr}_2\text{O}_3$: 1 – 800 °С, 2 – 850 °С, 3 – 900 °С, 4 – 1000 °С

Временной интервал $\Delta\tau$ возрастает с увеличением температуры изотермической выдержки.

Квазиравновесное состояние на временном интервале $\Delta\tau'$ наступает после окисления первых нескольких атомных слоев Cr_2O_3 , причем количество этих слоев, так же как и количество окисленных слоев в момент наступления химического равновесия в системе, экспоненциально возрастает с увеличением температуры изотермической выдержки. Величина кажущейся энергии активации окисления Cr^{3+} до Cr^{6+} равна 86 кДж/моль. Небезынтересно сравнить найденную нами величину кажущейся энергии активации с энергией активации диффузии ионов Cr^{3+} . В работе [8] дана энергия активации диффузии ионов хрома Cr^{3+} в Cr_2O_3 , равная 394 кДж/моль, т.е. намного больше полученной. Если считать, что окисление Cr_2O_3 происходит в результате перехода трех электронов иона Cr^{3+} в валентную зону или зону проводимости TiO_2 , энергия активации, согласно данным [9], будет равна

$$\varepsilon_A = 2 \frac{\sum_{i=4}^6 U_i}{\varepsilon^2} N_A, \quad (4)$$

где $\sum_{i=4}^6 U_i$ – сумма потенциалов ионизации 4, 5 и 6 электронов иона Cr^{3+} , N_A – число Авогадро; ε – диэлектрическая проницаемость TiO_2 . Коэффициент 2 в (4) означает, что одна молекула Cr_2O_3 содержит два иона Cr^{3+} . Энергия активации в этом случае равна 340 кДж/моль, т.е. также выше вычисленной нами.

Если окисление Cr^{3+} до Cr^{6+} связано с испарением хрома и конденсацией его на поверхности кристалликов TiO_2 , где и происходит акт элементарного взаимодействия, то количество хрома, которое может испариться с поверхности Cr_2O_3 , может быть вычислено по формуле

$$N_{исп} = N_{Scr} \exp(-E'_A / RT), \quad (5)$$

где E'_A – энергия активации отрыва хрома с поверхности в газовую фазу.

Согласно [10], энергию активации данного процесса можно принять равной 2/3 теплоты испарения $Q_{исп}$.

Количество хрома, который может испариться с поверхности Cr_2O_3 , и количество образовавшихся ионов $N_{х,р}Cr^{6+}$ в смеси состава 5 мас.% Cr_2O_3 –95 мас.% TiO_2 имеют зависимость от температуры изотермической выдержки, представленную в таблице.

Таблица

Зависимость количества испарившегося хрома $N_{исп}$ с поверхности Cr_2O_3 ,
и количества образовавшихся ионов $N_{х,р}Cr^{6+}$ от температуры изотермической выдержки

Температура, °С	800	850	900	1000
$N_{исп} \cdot 10^{-19}$	0,352	0,354	0355	0,356
$N_{х,рCr6} \cdot 10^{-19}$	1,99	2,78	3,56	4,1

Эти данные не позволяют считать, что окисление Cr^{3+} до Cr^{6+} происходит в результате испарения хрома. Более правильным, видимо, будет предположение, что Cr^{3+} окисляется до Cr^{6+} на поверхности Cr_2O_3 . Наличие квазиравновесных состояний в период окисления, вероятно, связано с тем, что образующийся продукт реакции, покрывая поверхность кристалликов Cr_2O_3 , задерживает доступ кислорода к зоне реакции до тех пор, пока не произойдет растрескивание и отделение его от поверхности кристалликов Cr_2O_3 . Отделение образующегося соединения Cr^{6+} происходит из-за упругих напряжений на границе раздела. Этот процесс является стохастическим, поэтому квазиравновесный временной интервал не имеет какой-либо закономерной зависимости от температуры изотермической выдержки.

Выводы

1. Методом магнетохимического анализа исследована кинетика массопереноса при окислении хрома на воздухе в системе из мелкодисперсных оксидов $TiO_2-Cr_2O_3$. Вычислена величина кажущейся энергии активации окисления Cr_2O_3 при 800–1000 °С.

2. Установлено, что в процессе взаимодействия окисляется до 10 атомных слоев Cr_2O_3 . Квазиравновесное состояние на временном интервале $\Delta\tau'$ наступает после окисления первых нескольких атомных слоев Cr_2O_3 , причем количество этих слоев, так же как и количество окисленных слоев в момент наступления химического равновесия, экспоненциально возрастает с увеличением температуры изотермической выдержки.

3. Показано, что массоперенос при взаимодействии оксидов носит стохастический, ступенчатый характер, а окисление Cr^{3+} до Cr^{6+} происходит на поверхности кристалликов Cr_2O_3 .

Работа выполнена при финансовой поддержке губернатора Челябинской области, грант РФФИ-Урал № 07-03-96009.

Литература

1. Клещев, Д.Г. Получение нанокристаллических оксидов Ti, Mn, Co, Fe и Zn в водных растворах при термообработке / Д.Г. Клещев // Неорганические материалы. – 2005. – Т. 41, № 1. – С. 46–53.
2. Волков, С.В. Синтез нанодисперсных порошков сложных оксидов титана и циркония / С.В. Волков, С.М. Малеванный, Э.В. Панов // Журнал неорганической химии. – 2002. – Т. 47, № 11. – С. 1749–1754.
3. Коленько, Ю.В. Синтез гидротермальным методом нанокристаллических порошков различных кристаллических модификаций TiO_2 / Ю.В. Коленько, А.А. Бурухин // Журнал неорганической химии. – 2002. – Т. 47, № 11. – С. 1755–1762.

4. Белая, Е.А. Особенности взаимодействия в системе $\text{TiO}_2(\text{анатаз})\text{-Cr}_2\text{O}_3$ / Е.А. Белая, В.В. Викторов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2006. – Вып. 7. – № 7(62). – С. 219–223.
5. Белая, Е.А. Окисление Cr_2O_3 в системе мелкодисперсных оксидов $\text{TiO}_2\text{-Cr}_2\text{O}_3$ / Е.А. Белая, В.В. Викторов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2007. – Вып. 8. – № 3(75). – С. 66–69.
6. Взаимодействие в системе мелкодисперсных оксидов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-Cr}_2\text{O}_3$ при 400–800 °С / В.В. Викторов, В.В. Гладков, А.А. Фотиев и др. // Изв. АН СССР. Сер. Неорган. материалы. – 1983. – Т. 19, № 6. – С. 930–933.
7. Влияние TiO_2 на окисление Cr_2O_3 в системе мелкодисперсных оксидов $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-Cr}_2\text{O}_3$ / В.В. Викторов, В.В. Гладков, А.А. Фотиев и др. // Изв. АН СССР. Сер. Неорган. материалы. – 1984. – Т. 20, № 4. – С. 686–688.
8. Взаимодействие в системах $\text{Al}_2\text{TiO}_5\text{-Fe}_2\text{O}_3$, $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-TiO}_2\text{-Fe}_2\text{O}_3$, $\text{Al}_2\text{TiO}_5\text{-Cr}_2\text{O}_3$ / Т.Л. Леканова, Ю.И. Рябков, О.А. Севбо, В.В. Викторов // Неорган. материалы. – 2004. – Т. 40, № 11. – С. 1355–1369.
9. Ржанов, А.В. Электронные процессы на поверхности полупроводников / А.В. Ржанов. – М.: Наука, 1974. – 480 с.
10. Френкель, Я.И. О поверхностном ползании частиц у кристалликов и естественной шероховатости кристаллических граней / Я.И. Френкель // ЖЭТФ. – 1964. – Т. 16, № 1. – С. 39–51.

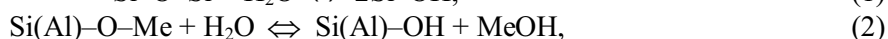
Поступила в редакцию 15 января 2008 г.

ИК СПЕКТРОСКОПИЯ И ПОВЕДЕНИЕ ВОДЫ В МОДЕЛЬНЫХ СТЕКЛАХ СИСТЕМЫ $\text{Na}_2\text{SiO}_3\text{--NaAlSi}_3\text{O}_8$

В.Е. Еремяшев, В.Н. Быков

Методом ИК спектроскопии в ближней области изучено взаимодействие воды со стеклами системы $\text{Na}_2\text{SiO}_3\text{--NaAlSi}_3\text{O}_8$. Установлены основные факторы, оказывающие влияние на растворимость воды в исследованных стеклах. Предпринята попытка описать полученные результаты с позиции теории ассоциированных растворов. Установлено, что растворение воды в исследованных стеклах можно рассматривать как взаимодействие с двумя составляющими их структуры: относительно деполимеризованной силикатной и высокополимеризованной алюмосиликатной. Сделан вывод о том, что при взаимодействии высокощелочных алюмосиликатных стекол с водой основным механизмом образования гидроксильных групп является протонно-катионный обмен.

При рассмотрении процесса взаимодействия воды с силикатными и алюмосиликатными стеклами предполагается возможность протекания двух различных механизмов образования гидроксильных групп: с разрывом связей Si–O–Si (1) и протонно-катионный обмен (2) [1–5]



где Me – Li^+ , Na^+ , K^+ .

Исследование структуры водно-силикатных стекол методами ЯМР и КР [6–8] позволило установить, что в стеклах с высоким содержанием SiO_2 реализуется механизм растворения H_2O с разрывом мостиковых связей Si–O–Si по реакции (1). Результаты, полученные в работе [9] для каркасных алюмосиликатных стекол указывают на то, что в растворении воды главную роль играет протонно-катионный обмен, описываемый реакцией (2). Малоизученным является вопрос взаимодействия воды с высокощелочными алюмосиликатными стеклами. В связи с этим нами методом ИК спектроскопии в ближней области было изучено взаимодействие воды со стеклами системы $\text{Na}_2\text{SiO}_3\text{--NaAlSi}_3\text{O}_8$.

Были синтезированы стекла состава: 21 мол.%Ms + 79 мол.%Ab (21 ms), 37 мол.%Ms + 63 мол.%Ab (37ms) и 49 мол.%Ms + 51 мол.%Ab (49 ms), где Ms – Na_2SiO_3 и Ab – $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$. Для синтеза исходных безводных стекол использовались реактивы Na_2CO_3 квалификации хч и SiO_2 и Al_2O_3 квалификации чда. Исходные смеси плавил в платиновых тиглях в силитовой печи при температуре 1350 °С в течении 48 часов. После гомогенизации расплава стекло отливали в графитовую форму и охлаждали на воздухе. Для приготовления шихты для опытов по гидратации стекло измельчалось в вибромельнице. Опыты проводили в тонкостенных золотых ампулах объемом от 3 до 7 см³, в которые помещали навеску шихты фракции 0,1 мм массой 1000 мг и 0,1–0,5 мл дистиллированной воды. Контейнер с заваренными ампулами помещали в реактор с внешней поддержкой давления при температуре 750 °С и давлении 250–1000 бар (см. таблицу). Продолжительность опытов составляла от 5 до 24 часов. Закалку производили в изобарических условиях проточной водой со средней скоростью 4–5 °С/с. Из полученных образцов были изготовлены плоскопараллельные пластины толщиной 0,5–3 мм для регистрации ИК спектров.

ИК спектры пропускания регистрировались на двухлучевом спектрометре Specord-61. Во всех ИК спектрах в ближней области (4000–8000 см⁻¹) наблюдаются две полосы составных колебаний воды в гидроксильной и молекулярной формах: 4500 (ОН-группы) и 5200 см⁻¹ (H_2O). Отмечено присутствие дополнительной полосы с максимумом около 4100–4200 см⁻¹, которую иногда связывают с колебаниями воды, но однозначной ее интерпретации нет. Используя методику количественного определения содержания воды в разных формах по полосам 4500 и 5200 см⁻¹ в ИК спектрах [1, 10] была определена концентрация воды в молекулярной и гидроксильной формах во всех полученных стеклах. Для этого были использованы коэффициенты молярного поглощения $\varepsilon_{5200} = 1,61$ литр·моль⁻¹·см⁻¹ и $\varepsilon_{4500} = 1,1$ литр·моль⁻¹·см⁻¹ [10]. Результаты представ-

лены в таблице. Общее содержание воды определялось как сумма концентрации воды в молекулярной и гидроксильной формах.

Состав стекол, условия их гидратации и содержание воды в разных формах.

Образец	Состав			Температура, °С	Давление, бар	Время, час	Общее содержание воды, мас. %	Молекулярная вода, мас. %	ОН группы, мас. %
	Na ₂ O, мол %	Al ₂ O ₃ , мол %	SiO ₂ , мол %						
21ms	20,44	9,85	69,71	700	1000	24	5,08	3,44	1,64
				700	500	24	3,48	1,98	1,50
				700	270	4	2,70	1,30	1,40
37ms	27,57	7,85	64,58	700	1000	24	4,88	3,48	1,40
				700	500	24	3,44	2,13	1,31
				700	270	4	2,54	1,30	1,24
49ms	32,99	6,39	60,62	700	1000	24	4,60	3,40	1,20
				700	500	24	3,18	1,98	1,20
				700	300	4	1,88	0,77	1,11

Из таблицы видно, что растворимость воды в исследованных стеклах пропорциональна давлению, что соответствует ранее установленным закономерностям [11–13]. Кроме этого, общее содержание воды при каждом давлении зависит от состава и уменьшается с ростом Na₂SiO₃, т.е. с уменьшением содержания Al в стекле. Зависимость концентрации молекулярной воды и гидроксильных групп от общего содержания воды (см. рисунок) аналогична соответствующим зависимостям для ранее изученных стекол состава NaAlSi₃O₈ [1, 2, 14].

Взаимодействие между компонентами силикатного стеклообразующего расплава могут быть описаны в рамках модели идеальных или атермических ассоциированных растворов, состоящих из силикатных или алюмосиликатных анионных комплексов, катионов металла, свободных ионов кислорода, O²⁻ и гидроксильных групп OH. Это позволяет при расчете констант равновесия пользоваться простыми уравнениями, не вводя дополнительных ограничений на поведение компонентов. При расчете константы равновесия для стекол, которые рассматривались как расплавы, замороженные вблизи температуры стеклования, было использовано следующее соотношение, соответствующее реакции (1) с разрывом связей Si–O–Si:

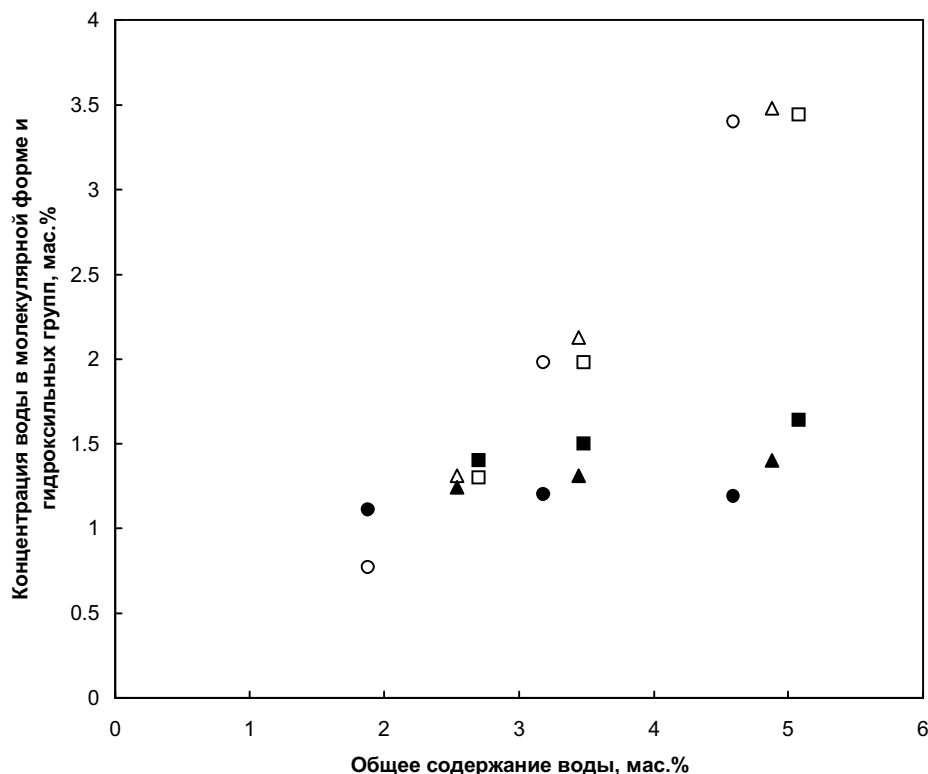
$$K = \frac{(N_{\text{Si-OH}})^2}{(N_{\text{Si-O-Si}} - 0,5 \cdot N_{\text{Si-OH}}) \cdot (N_{\text{H}_2\text{O}} - 0,5 \cdot N_{\text{Si-OH}})} \quad (3)$$

Расчет показал, что значения K для исследованных стекол разного состава различаются на порядок. Это противоречит тому, что взаимодействие воды с алюмосиликатными расплавами и стеклами осуществляется путем разрыва мостиковых связей Si–O–Si и предполагает другой механизм образования гидроксильных групп в стекле, включающий обмен между протонами и катионами натрия, компенсирующими избыточный отрицательный заряд в тетраэдрах AlO₄ или координирующими немостиковые атомы кислорода.

Соответственно, константы равновесия K могут быть представлены следующими соотношениями:

$$K = \frac{(N_{\text{Al-OH}})^2}{(N_{\text{Na(Al)}} - N_{\text{Al-OH}}) \cdot (N_{\text{H}_2\text{O}} - N_{\text{Al-OH}})} \quad (4)$$

$$K = \frac{(N_{\text{Si-OH}})^2}{(N_{\text{Na-O-Si}} - N_{\text{Si-OH}}) \cdot (N_{\text{H}_2\text{O}} - N_{\text{Si-OH}})} \quad (5)$$



Зависимость концентрации гидроксильных групп и молекулярной воды от ее общего содержания
 ○ – стекло состава 21 мол.%Ms+79 мол.%Ab, △ – стекло состава 37 мол.%Ms+63 мол.%Ab, □ – стекло состава 49 мол.%Ms + 51 мол.%Ab (закрашенные символы – гидроксильные группы, незакрашенные – молекулярная вода)

Расчет показал, что в обоих случаях константы равновесия K для стекол разного состава также значительно различаются и взаимодействие воды с исследованными алюмосиликатными стеклами имеет более сложный характер.

В исследовании [15] установлено, что при взаимодействии оксида натрия с расплавом и стеклом альбитового состава $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$ имеет место селективная модификация полностью полимеризованной алюмосиликатной сетки, которую можно рассматривать как состоящую из двух частей: одной – представленной относительно деполимеризованными силикатными анионами и второй – высокополимеризованными алюмосиликатными группировками. В связи с этим взаимодействие воды с исследованными стеклами можно рассматривать как взаимодействие с этими составляющими структуры, которые характеризуются своими константами равновесия. Константа равновесия K для взаимодействия воды с каркасной алюмосиликатной частью структуры была рассчитана по уравнению (4) по стеклу состава $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$, структура которого представляет полностью полимеризованной трехмерной алюмосиликатной сеткой. Ее значение равно 0,35. С этим значением константы для стекол 21 ms, 37 ms и 49 ms была рассчитана доля воды, растворенной только в этой части структуры, и ее распределение между молекулярной формой и гидроксильными группами. При этом мы исходили из того, что общая растворимость воды в алюмосиликатных стеклах, главным образом, зависит только от РТ условий и доли $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$ в составе стекла. Концентрация воды в силикатной части была определена как разница между общим содержанием воды и ее концентрацией в алюмосиликатной части структуры. Расчет константы равновесия для этой части структуры на основании уравнения (5) показал, что ее значение близко к нулю, что согласуется с данными [16] для силикатных стекол с высоким содержанием щелочей.

Таким образом, анализ полученных значений концентрации воды в молекулярной форме и гидроксильных групп позволил установить, что в каркасной части структуры растворение воды происходит в двух формах, и концентрация гидроксильных групп совпадает с их общим содержанием. В то же время растворение воды в силикатной части происходит только в молекулярной форме. То есть, при изменении состава от $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8$ к NaSiO_3 уменьшение концентрации гидроксильных групп происходит за счет уменьшения доли алюмосиликатной части структуры. Сле-

дует отметить, что вывод о протекании реакций протонно-катионного обмена при взаимодействии изученных щелочных алюмосиликатных стекол с водой не противоречит тому, что в стеклах с высоким содержанием SiO_2 реализуется механизм с разрывом мостиковых связей Si-O-Si . Смена механизма при увеличении в стеклах содержания SiO_2 связана с возрастанием числа мостиковых связей и уменьшением содержания ионов Na в разных структурных позициях.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант 07-05-96008.

Литература

1. Silver, L.A. Water in albitic glasses / L.A. Silver, E.M. Stolper // *Journal of Petrology*. – 1989. – № 30. – P. 667–710.
2. Silver, L.A. The influence of bulk composition on specification of water in silicate glasses / L.A. Silver, P.D. Ihinger, E. Stolper // *Contribution of Mineralogy and Petrology*. – 1990. – V. 104, № 2. – P. 142–162.
3. Burnham, C.W. The role H_2O in silicate melts: I. P-V-T relations in the system $\text{NaAlSi}_3\text{O}_8\text{-H}_2\text{O}$ to 1 kilobars and 1000°C / C.W. Burnham, N.F. Davis // *American Journal of Sciences*. – 1971. – V. 270. – P. 54–79.
4. Newman, S. Measurement of water in rhyolitic glass: Calibration of an infrared spectroscopic technique / S. Newman, E. Stolper, S. Epstein // *American mineralogist*. – 1986. – V. 71, № 11–12. – P. 1527–1541.
5. Stolper, E.M. The specification of water in silicate melts / E.M. Stolper // *Geochimica et Cosmochimica Acta*. – 1982. – V. 46, № 12. – P. 2609–2620.
6. McMillan, P.F. Hydroxyl sites in SiO_2 glass: A note on infrared and Raman spectra / P.F. McMillan, R.L. Ir. Remmele // *American Mineralogist*. – 1986. – V. 71. – P. 772–778.
7. Structural role of H_2O in sodium silicate glasses: results from ^{29}Si and ^1H NMR spectroscopy / J. Kumerlen, L.H. Mervin, A. Sebal, H. Keppler // *Journal of Physical Chemistry*. – 1992. – V. 96, № 15. – P. 6405–6410.
8. Zotov, N. The influence of water on structure of hydrous sodium tetrasilicate glasses / N. Zotov, H. Keppler // *American Mineralogist*. – 1998. – V. 83. – P. 823–834.
9. Kohn, S.C. A multinuclear magnetic resonance study of the structure of hydrous albite glasses / S.C. Kohn, R. Dupree, M.E. Smith // *Geochimica et Cosmochimica Acta*. – 1989. – № 11. – P. 2925–2936.
10. Dixon, J.E. An experimental study of water and carbon dioxide solubilities in mid-ocean ridge basaltic liquids / J.E. Dixon, M.E. Stolper, J.R. Holloway // *Journal of Petrology*. – 1994. – V. 35. – P. 1–87.
11. Кадик, А.А. Условия термодинамического равновесия силикатный расплав-вода / А.А. Кадик, Н.И. Хитаров // *Геохимия*. – 1963. – № 10. – С. 137–163.
12. H_2O solubility in haplogranitic melts: Compositional, pressure and temperature dependence / F. Holtz, H. Behrens, D. Dingwell *et al* // *American Mineralogist*. – 1995. – V. 80. – P. 94–108.
13. Tomlinson, J.W. A note of the solubility of water in a molten sodium silicate / J.W. Tomlinson // *Journal Soc. Glass Technol.* – 1956. – V. 40, № 192.
14. Stolper, E.W. Water in Silicate Glasses: An Infrared Spectroscopic Study / E.W. Stolper // *Contributions Mineralogy and Petrology*. – 1982. – V. 81, № 1. – P. 1–17.
15. Быков, В.Н. Структура алюмосиликатных расплавов по данным спектроскопии комбинационного рассеяния / В.Н. Быков, В.Н. Анфилогов, С.Н. Кузнецов // *Геохимия*. – 1996. – № 4. – С. 331–338.
16. Bartholomew, R.F. Infrared spectra of a water-containing glass / R.F. Bartholomew, B.L. Butler, H.L. Hoover, C.K. Wu // *Journal of American Ceramic Society*. – 1980. – V. 63, № 9–10. – P. 481–485.

Поступила в редакцию 4 сентября 2007 г.

АНАЛИЗ СТРУКТУРНЫХ ТЕРМИЧЕСКИХ ДЕФОРМАЦИЙ ПИРОВАНАДАТА КАДМИЯ

*М.В. Ротермель, А.Н. Чванова, Т.И. Красненко,
С.А. Петрова, Р.Г. Захаров, В.В. Викторов*

Структурные термические трансформации $\text{Cd}_2\text{V}_2\text{O}_7$ в области температур от комнатной до 900°C детально исследованы на основе анализа межатомных расстояний и угловых характеристик кадмий-кислородных полиэдров, рассчитанных из результатов высокотемпературного рентгенографирования. Установлено влияние термической деформации полиэдрических составляющих структуры пированадата кадмия на формирование структурно-чувствительных свойств – испарения и проводимости.

Пированадат кадмия $\text{Cd}_2\text{V}_2\text{O}_7$ является перспективным материалом для создания твердотельного источника атомов кадмия [1]. Интересно, что эмиссия атомов кадмия наблюдается в узком температурном интервале: от 600 до 720°C . Кристаллохимическая аттестация пированадата кадмия в более широком температурном интервале позволит выявить роль структурных трансформаций соединения в формировании эмиссионного спектра.

Элементарная ячейка $\text{Cd}_2\text{V}_2\text{O}_7$ принадлежит моноклинной сингонии, пр.гр. $C2/m$, с параметрами $a = 7,077(4)$ Е, $b = 8,996(2)$ Е, $c = 4,976(2)$ Е, $\beta = 103,20(4)^\circ$, $V = 303,5(2)$ Е³ при комнатной температуре. Проекция кристаллической структуры $\text{Cd}_2\text{V}_2\text{O}_7$ на плоскости ac и ab представлена на рис. 1. Атомы ванадия окружены атомами кислорода по тетраэдру, которые сочленены по centrosymmetric закону в диортогруппы. Атом $\text{O}1$ является мостиковым, длина связи $\text{V} - \text{O}1$ максимальна и составляет $1,762(1)$ Е. Расстояния $\text{V} - \text{O}2$ и $\text{V} - \text{O}3$ равны $1,675(9)\times 2$ и $1,706(1)$ Е соответственно. Угол разворота ванадий-кислородных тетраэдров $\text{V} - \text{O}1 - \text{V}$ составляет 180° и неизменен на всем исследованном температурном интервале (следствием чего является возможность участия ванадий-кислородных полиэдров как в тепловом расширении за счет изменения длин связей ванадий-кислород, так и во вращении полиэдров вокруг оси ванадий-кислород-ванадий). Атомы кадмия координированы шестью атомами кислорода. Cd -октаэдры чередуются вдоль оси c структуры со слоями из ванадиевых полиэдров. Связи $\text{Cd} - \text{O}$ попарно равны. Расстояния $\text{Cd} - \text{O}_2$ и $\text{Cd} - \text{O}_3$ близки и равны $2,285(2)\times 2$ и $2,230(9)\times 2$ Е соответственно. Связь $\text{Cd} - \text{O}'_3$ значительно длиннее и составляет $2,386(1)\times 2$ Е при $t = 25^\circ\text{C}$. Кадмий-кислородные октаэдры соединены друг с другом через общие ребра, образуя зигзагообразные колонки, вытянутые вдоль оси a . При этом CdO_6 -октаэдр через один соединён с соседним $\text{Cd}'\text{O}_6$ -октаэдром параллельной цепочки через ребро, образуя пару. Таким образом, металл-кислородная подрешётка представляет собой слои сотообразной структуры, лежащей в плоскости ab , бесконечно повторяющиеся

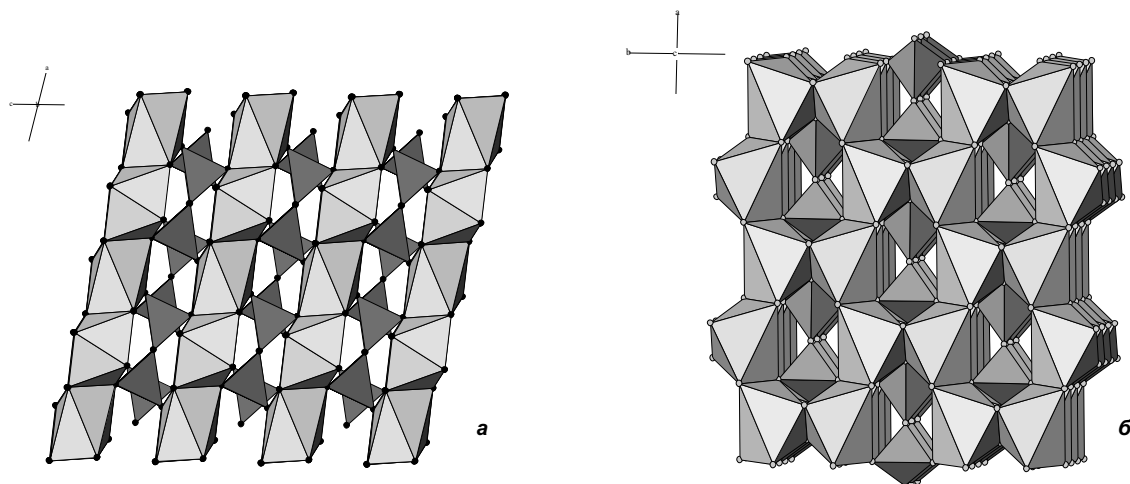


Рис. 1. Проекция кристаллической структуры $\text{Cd}_2\text{V}_2\text{O}_7$: a – на плоскость ac ; b – на плоскость ab .

вдоль оси c . Плавится пированадат кадмия конгруэнтно при 1000 ± 20 °С, полиморфные переходы в $\text{Cd}_2\text{V}_2\text{O}_7$ не обнаружены.

Необходимо отметить, что скорость изменения параметров элементарной ячейки с ростом температуры различна (рис. 2). Наиболее подвержены изменениям параметры a и β , в то время как ктр вдоль осей b и c на порядок ниже. Зависимости кристаллохимических параметров от температуры немонотонны: от 25° до 600 °С структура равномерно расширяется вдоль всех направлений; в интервале 600–700 °С ктр вдоль осей a , b и c уменьшается незначительно, в то время как скорость изменения угла моноклинности становится на порядок меньше, что свидетельствует о резком уменьшении сдвиговой деформации решётки. При дальнейшем повышении температуры до 780 °С изменениям подвергается только параметр a , сдвиговая компонента отсутствует; в интервале 800–900 °С вновь интенсифицируется расширение всех кристаллографических параметров. Укрупненно политермы параметров на участке 600–900 °С представлены на рис. 3.

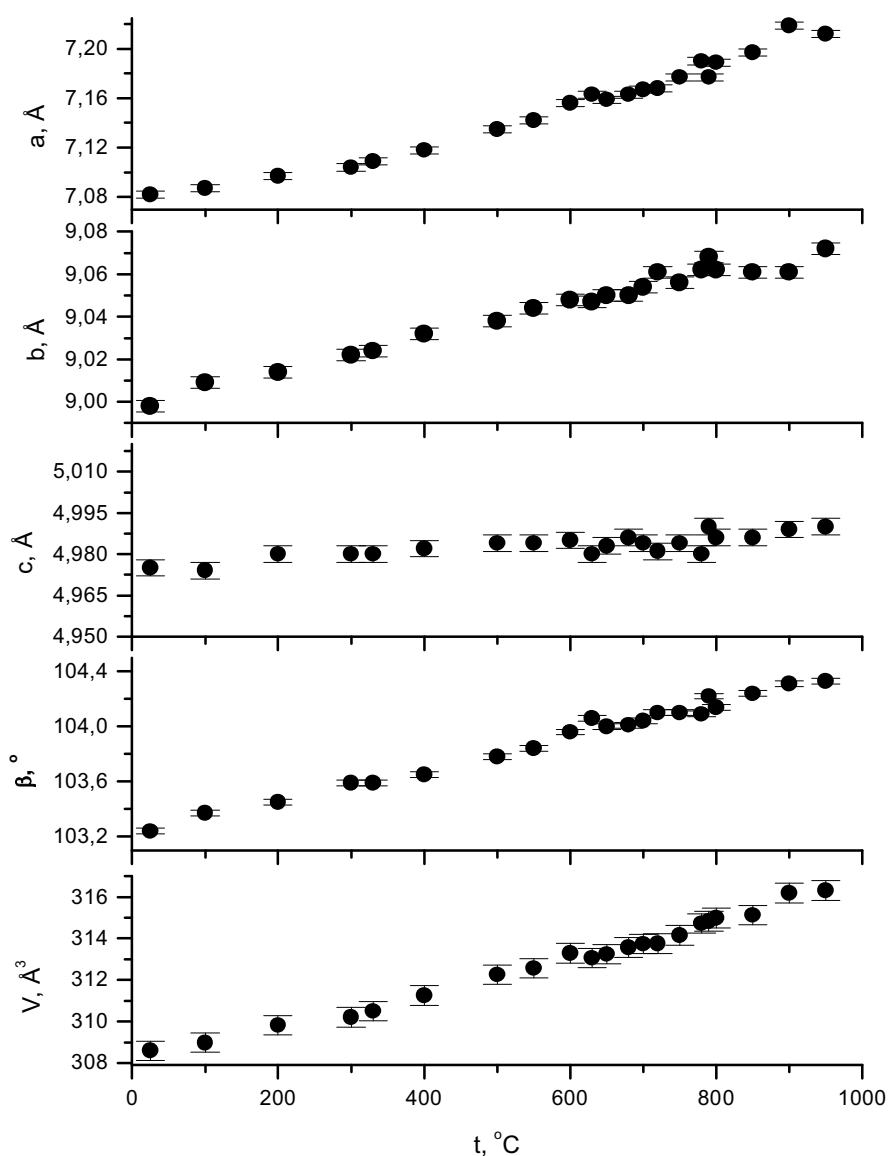


Рис. 2. Политермы параметров элементарной ячейки $\text{Cd}_2\text{V}_2\text{O}_7$

Для выяснения структурной обусловленности транспортных свойств были сделаны расчеты межатомных длин связей $\text{Cd}_2\text{V}_2\text{O}_7$. Наименьшим изменениям подвергается связь V – O3: на всем температурном интервале она незначительно возрастает в пределах ошибки измерений. Длина связи V – O2, направленной вдоль оси с, при нагреве от комнатной температуры до 600°C сокращается, при дальнейшем нагревании до 900 °C остаётся постоянной. Наибольшим изменениям подвергается связь V – O мост, параллельная оси а. С ростом температуры до 600 °C IV – O1 увеличивается, на втором участке 600–710 °C ктр вдоль этого направления уменьшается на порядок, при дальнейшем повышении температуры увеличение длины связи постепенно интенсифицируется. Тетраэдрические углы O – V – O с ростом температуры увеличиваются в среднем на 0,221°. Исключение составляет сужающийся угол O3 – V – O2, изменения которого максимальны и составляют 0,46(8)°. Три из четырёх связей удлиняются, причём наибольшие изменения претерпевает IO1 – O3 ($\alpha = 1,92 \cdot 10^{-5}$ 1/град), лежащая в плоскости *ab*. Длина связи O3 – O2 незначительно уменьшается, $\alpha = -1,22 \cdot 10^{-6}$ 1/град. Сопоставление изменений в линейных и угловых параметрах тетраэдров позволяет говорить, что с ростом температуры ванадий-кислородные диортогруппы вытягиваются вдоль оси а, при этом происходит их разворот о чём свидетельствует изменения угла O3 – Oмост – O2 диортогруппы [V2O7] от 118,512° при комнатной температуре до 119,524°

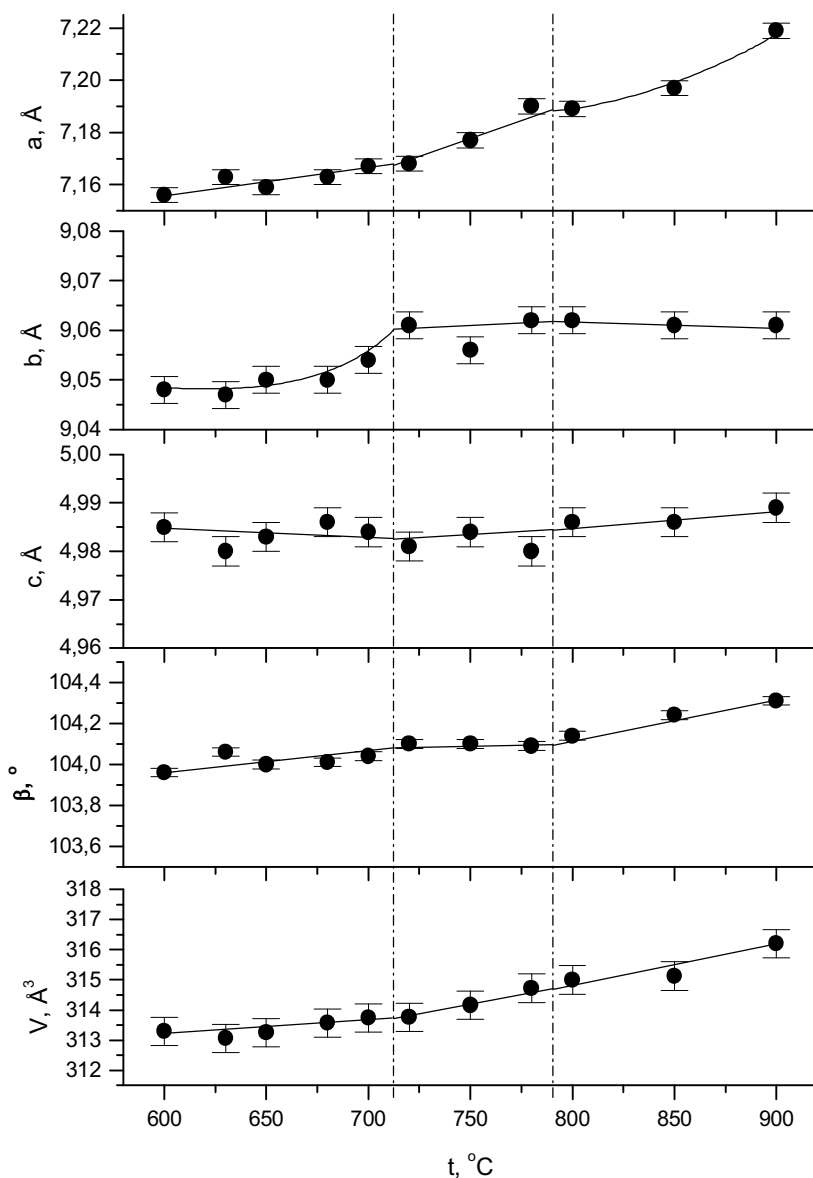


Рис. 3. Политермы параметров элементарной ячейки $\text{Cd}_2\text{V}_2\text{O}_7$ в интервале температур 600–900 °C

при 900 °С. Расчет показал, что объём ванадий-кислородных тетраэдров с ростом температуры возрастает на 2,53 %.

Анализ зависимостей длин кадмий-кислородных связей от температуры выявил следующее. Наименьшим изменениям подвергается связь Cd – O1: на всём исследованном температурном интервале она остаётся постоянной в пределах ошибки измерений. Скорость роста $l_{Cd-O2(3)}$ при нагревании различна. В интервале от комнатной температуры до 600 °С длины обеих связей увеличиваются, при этом ктр l_{Cd-O3} на порядок выше. На втором участке от 600 до 720 °С изменений длин Cd – O2 и Cd – O3 не происходит. Дальнейший рост температуры до 780 °С интенсифицирует расширение и l_{Cd-O2} , и l_{Cd-O3} . В предплавильной области 800–900 °С длина связи Cd – O2 остаётся постоянной, увеличение же Cd – O3 происходит с ещё большим ктр. Октаэдрические углы O – Cd – O при нагревании изменяются в среднем на 0,435°. Углы между атомом кадмия и атомами кислорода, образующими рёбра, соединяющие октаэдры, [O2(O'2) – Cd – O3(O'3) и O1 – Cd – O'1], с ростом температуры уменьшаются на примерно одинаковую величину – 0,682°. Увеличение развёрнутых углов [O'2(O2) – Cd – O3(O'3) и O'2(O2) – Cd – O1(O'3)] достигает 0,591°. Изменения оставшихся октаэдрических углов лежат в пределах ошибки измерений $\pm 0,15^\circ$. Минимальные изменения претерпевают длины рёбер O3(O'3) – O2(O'2) и O1 – O'1, связывающих CdO₆-октаэдры, ктр которых равны $6,13 \cdot 10^{-6}$ и $-4,68 \cdot 10^{-6}$ 1/град соответственно. Коэффициенты термического расширения остальных O – O связей на порядок выше.

Длины связей Cd – Cd в парных полиэдрах увеличиваются при нагревании до 600 °С, при дальнейшем повышении температуры остаются постоянными в пределах ошибки измерений. Коэффициенты термического трансформаций расстояний Cd – Cd в колонках на порядок выше на всем температурном интервале. Кроме того, зависимость l_{Cd-Cd} от температуры немонотонна: от 25° до 600 °С длина связи растёт, затем до 720 °С остаётся практически постоянной, на двух оставшихся температурных интервалах 720–780 °С и 780–900 °С рост Cd – Cd интенсифицируется.

Исходя из описанных выше изменений в кадмий-кислородных полиэдрах очевидно, что с ростом температуры кадмий-кислородные колонки вытягиваются в направлении параллельном оси *a*, при этом расстояния между ними уменьшаются, о чём свидетельствует уменьшение угла O3 – O1 – O3 между соединёнными в пары октаэдрами от 57,044° при комнатной температуре до 56,553° при 900 °С. Угол разворота кадмий-кислородных полиэдров, образующих колонки, O'2 – O3 – O'1 увеличивается от 82,052° при 25 °С до 82,591° при 900 °С, следовательно, их зигзагообразная форма становится менее выраженной с ростом температуры. Общее изменение структуры кадмий-кислородной подрешётки с ростом температуры приводит к вытягиванию образуемых ими соттообразных полосей, занятых ванадий-кислородными диортогруппами, что, по-видимому, и вызывает значительные деформации «жесткой» подрешётки, сопоставимые по величине с деформациями «мягких» кадмий-кислородных полиэдров. В целом, за счёт разворотов и увеличения объёмов полиэдров структура становится более компактной при повышенных температурах.

В масс-спектре испарения Cd₂V₂O₇ идентифицированы природные изотопы кадмия в интервале температур 600–720 °С. В этом температурном интервале минимальны изменения длин связей ванадий-кислород и кадмий-кислород, минимальна сдвиговая деформация структуры. При нагреве образца пированадата кадмия в этом температурном интервале происходит эмиссия ионов кадмия. Термоактивированный процесс выхода атомов кадмия с поверхности образца сопровождается образованием дырок, или эквивалентным ему изменением зарядового состояния ионов кислорода. Близость значений энергий активации проводимости, изменяющейся от 0,5 до 1,0 эВ при температурах выше 600 °С и испарения изотопа кадмия ¹¹⁴Cd, составляющей 0,4–0,7 эВ, свидетельствует о наиболее вероятном электронном характере процесса переноса заряда. Доминирующая дырочная проводимость обеспечивается, скорее всего, перераспределением электронной плотности в «мягкой» металл-кислородной подрешётке. Рост межатомных расстояний Cd-Cd в колонках обеспечивает уменьшение валентных усилий на кислород-кислородных связях в этой подсистеме, что в свою очередь делает более вероятным образование дырок, переносимых в электрическом поле вдоль этих направлений. Структурные трансформации, происходящие при изменении температуры, определяют и величину электронной плотности на связях кадмий-кислород и, соответственно, энергию связи и испарения ионов кадмия.

Коэффициенты термического расширения кристаллохимических параметров $\text{Cd}_2\text{V}_2\text{O}_7$
при различных температурах

Температурный интервал	25–550 °С	600–700°С	720–780°С	800–900°С	25 – 900°С
α_a , 1/град	$1,61 \cdot 10^{-5}$	$1,54 \cdot 10^{-5}$	$5,11 \cdot 10^{-5}$	$4,17 \cdot 10^{-5}$	$2,21 \cdot 10^{-5}$
α_b , 1/град	$9,74 \cdot 10^{-6}$	$6,63 \cdot 10^{-6}$	$1,84 \cdot 10^{-6}$	$1,10 \cdot 10^{-6}$	$8,01 \cdot 10^{-6}$
α_c , 1/град	$3,44 \cdot 10^{-6}$	$2,01 \cdot 10^{-6}$	$-3,35 \cdot 10^{-6}$	$6,02 \cdot 10^{-6}$	$3,22 \cdot 10^{-6}$
α_β , 1/град	$1,11 \cdot 10^{-5}$	$4,81 \cdot 10^{-6}$	$-1,60 \cdot 10^{-6}$	$1,63 \cdot 10^{-5}$	$1,18 \cdot 10^{-5}$
α_γ , 1/град	$2,45 \cdot 10^{-5}$	$1,44 \cdot 10^{-5}$	$5,10 \cdot 10^{-5}$	$3,81 \cdot 10^{-5}$	$2,81 \cdot 10^{-5}$

Работа выполнена при поддержке фонда РФФИ, проект № 07-03-01-063а.

Литература

1. Политермы электропроводности, скорости испарения и параметров элементарной ячейки пированадатов стронция и кадмия / Т.И. Красненко, В.С. Петров, Л.В. Кудрина и др. // Неорган. материалы. – 1991. – Т. 27, № 7. – С. 1511 – 1513.

Поступила в редакцию 19 сентября 2007 г.

ЕДИНАЯ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКАЯ ПРИРОДА КОЛЕБАТЕЛЬНОГО ДВИЖЕНИЯ В ОКСИГИДРАТНЫХ ГЕЛЯХ ПРИ ТОКОВЫХ ВЫПЛЕСКАХ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫМИ ИЗМЕНЕНИЯМИ ДИНАМИЧЕСКОЙ ВЯЗКОСТИ

Ю.И. Сухарев, К.И. Носов

В статье проведено объединение идей слабого хаоса с экспериментально обнаруженными нелинейными свойствами оксигидратных гелевых систем.

Введение

В гелевых образцах оксигидрата циркония наблюдается сложная система движения (как линейно-перемещательного и колебательно-вращательного) крупных макромолекулярных образований (микроэлектрофорез) [1], так и ионного потокового направленного перемещения внутри или вокруг них. Помимо молекулярно конформерного движения существует и поступательное перемещение гелевых макромолекул иной природы (это установлено Дерягиным [2]). Поэтому представляется вполне реальным возникновение разности потенциалов на платиновых электродах и, следовательно, возможна экспериментальная регистрация микротоков в системе во времени. Кроме того, эти динамические системы постоянно эволюционируют, вследствие развития в оксигидрате циркония процессов полимеризации – деструкции, самопроизвольной гидратации, дегидратации и т.д., в которых участвуют ионно-молекулярные потоковые выплески. Поэтому наблюдается периодическое (колебательное) изменение динамической вязкости оксигидратных систем, что продемонстрировано нами в [3]. Следует отметить, что форма геометрического объема геля (форма электрохимической ячейки), вероятно, очень сильно, если не определяюще, характеризует величину возникающей разности потенциалов в гелевой системе, так как линейная скорость зависит от нормального сечения электрохимической ячейки. Все названные явления можно описать с единых физических позиций и математических представлений, которые используются для анализа квазикристаллического состояния [4]. В статье проведено компилятивно-теоретическое объединение идей [4] слабого хаоса с экспериментально обнаруженными авторами нелинейными свойствами оксигидратных гелевых систем.

Экспериментальные результаты

Методики синтеза оксигидрата циркония и наблюдение за его физико-химическим состоянием описаны нами в [5–7].

При исследовании влияния времени созревания геля в маточном растворе, использовали большую емкость реактора (20 л). Объем раствора оксихлорида циркония 2 л разбавляли водой до 6 л. При постоянном перемешивании механической мешалкой из капельной воронки добавляли раствор аммиака 1:9 ($\rho = 0,987 \text{ г/см}^3$) по каплям до $\text{pH} = 9,25$. Свежеприготовленный гелеобразный осадок выдерживали в маточном растворе при очень медленном перемешивании в течение 60 суток. Для исследования тока системы гель оксигидрата циркония через сутки отбирали из общей емкости и помещали в электро-химическую ячейку.

Способ наблюдения за ионно-молекулярными потоками, характеризующими разрушение ДЭС макромолекулярных конформеров при их течении (динамической вязкости) – опосредованный, так как представляет собой наблюдение изменений вязкостных характеристик с помощью прибора Реотест-2, в котором в качестве регистрирующей системы используются коаксиальные вращающиеся цилиндры. Вязкость гелевых оксигидратных систем, представляющих собой неньютоновские жидкости, определяется взаимодействием изменяющихся ДЭС макромолекул во времени, вследствие их конформерных трансформаций, а, следовательно, и взаимодействием ионно-молекулярных потоков при трении (при небольших напряжениях сдвига), как это показано в работе [3].

Электрическую регистрацию характеристики вязкости стандартным прибором пришлось видоизменить. Для этих целей установка Реотест-2 была переоборудована и оснащена электронным модулем Е-270 с частотой опроса исследуемой системы 5 раз в секунду. Модуль Е-270 [8]

является современным универсальным программно-аппаратным устройством, которое используется со стандартной шиной USB и предназначено для построения многоканальных измерительных систем ввода, вывода и обработки аналоговой и цифровой информации в составе персональных IBM совместимых компьютеров.

Обсуждение результатов

В оксигидратных гелевых системах (оксигидрата циркония), как нами показано ранее [9], колебательно-вращательные ионно-молекулярные потоки вызываются огромным множеством относительно редких стохастических трансформаций макромолекул геля (конформерные переходы), которые, оставаясь координатно малоподвижными (если рассматривать координату их центра масс) в пространстве ячейки (вследствие своей огромной массы), непрерывно «накачивают» постоянно возобновляемые (колебательные) ионно-диффузионные потоки в геометрически вытянутом объеме геля. Эти потоки образуются из геометрически видоизменяющихся ДЭС, окружающих конформеры. В этом состоит смысл и своеобразие диффузии Арнольда в гелях. Эти переходы можно рассматривать как периодические толчки или возмущения гелевой системы.

Известно [4], что в общем случае любая динамическая система имеет неустраняемую область стохастичности в фазовом пространстве. Фактически это классические представления Ланжевена [10]. Гамильтониан такой колебательно-вращательной ионно-молекулярной коллоидно-химической системы можно записать в форме:

$$H = H_0(I) + \epsilon V(I, \theta, t). \quad (1)$$

Здесь I, θ – N_0 -мерные векторы. Такая система имеет $N = N_0 + 1/2$ степеней свободы, причем $1/2$ относится к переменной t (время). В общем случае часть гамильтониана $H_0(I)$ имеет сепаратрисы, поэтому возмущение ϵV , разрушая их, образует стохастические слои при любых ϵ . Дальнейшая судьба стохастических траекторий определяется тем, какова топология слабого хаоса коллоидно-химической системы в фазовом пространстве. Объединение всех стохастических слоев в фазовом пространстве может образовать единую сеть – стохастическую паутину.

Как образуется стохастическая паутина в оксигидратной коллоидно-химической системе? КАМ – теория [10], определяющая условия сохранения инвариантных торов гамильтоновских систем при действии на коллоидно-химические системы малого возмущения. В соответствии с этой теорией количество разрушенных торов невелико, поэтому определенные области, в которых лежат разрушенные торы, зажаты между инвариантными торами. Если торы, вложенные друг в друга, могут пересекаться, то различные стохастические слои оказались бы соединенными друг с другом, сетью каналов со стохастической динамикой внутри рис. 4. По топологическим причинам такое пересечение возможно лишь при $N > 2$.

Рассмотрим для ионных потоков случай $N = 2$. Гамильтониан системы записывается в обычном виде:

$$H = H_0(I_1, \dots, I_N) + \epsilon V(I_1, \theta_1; \dots; I_N, \theta_N). \quad (2)$$

Выделим резонансные торы, которые определяются уравнением

$$\sum_{j=1}^N n_j \omega_j = 0, \quad (3)$$

где n_j – какие-либо целые числа, $\omega_j = \partial H_0 / \partial I_j$ ($j = 1, \dots, N_0$). Каждая частота динамической системы $\omega_j = \omega_j(I_1, \dots, I_N)$ является функцией, вообще говоря, всех действий (I_j). Каждое решение $I^{(0)}$ определяет резонансный тор. С ним связано, с одной стороны, образование сепаратрисной петли и, с другой стороны, ее разрушение и появление на ее месте стохастического слоя. При этом предполагается отсутствие вырождения по частотам:

$$\det \left[\frac{\partial^2 H_0}{\partial I_i \partial I_j} \right] \neq 0.$$

Если перейти от переменных (I_1, I_2) к переменным (ω_1, ω_2) , то на континуальную энергетическую поверхность можно записать в самом общем случае:

$$E = H_0(I_1, I_2).$$

Это значит, что резонансные торы на заданной энергетической поверхности определяются некоей системой уравнений [10, с. 83], для каждой пары целых чисел (n_1, n_2) . Решениями этих уравнений могут быть точки на плоскости (ω_1, ω_2) . Каждой точке соответствует один резонанс и каждому резонансу соответствует стохастический слой, который создает на плоскости область хаоса. Итак, возмущение коллоидно-химической системы под действием $\in V$ приводит к образованию областей фазового пространства, внутри которых динамика ионно-молекулярных потоков (токовых выплесков) стохастическая. Слабый хаос может реализоваться или в виде стохастических слоев (при $N > 1$), или в виде стохастической паутины (при $N > 2$). Естественно, визуализация этой динамики может дать нам определенные экспериментальные представления о структуре самого геля. Анализ этих экспериментальных токовых выплесков, вероятно, позволит создать новые принципы, новые методы структурного анализа коллоидного состояния вещества.

Заславским проведен анализ некоторой динамической системы вообще, возникающей в резонансном случае. Если подставить для H_0 следующее выражение

$$\tilde{H}_0 = \in \frac{\omega_0^2}{k^2} J_{n_0}(k\rho) \in \cos\theta = \in \frac{\omega_0^2}{k^2} J_{n_0}(k(2n_0 I / \omega_0)^{1/2}) \cos\theta, \quad (4)$$

то можно получить систему гиперболических точек $(\rho_h, \theta_h): J_{n_0}(k\rho_h) = 0, \theta_h = \pm\pi/2$ и эллиптических точек $(\rho_e, \theta_e): J'_{n_0}(k\rho_e) = 0, \theta_e = 0, \pi$.

Семейство сепаратрис образовано $2n_0$ лучами и пересекающимися их окружностями с радиусами $\rho_h^{(s)}$, где $k\rho_h^{(s)}$ – различные корни функции Бесселя J_{n_0} . В ячейках паутины, образованной сепаратрисами, движение происходит по замкнутым орбитам вокруг эллиптических точек. Эти точки расположены в центрах ячеек. Так описывается практически невозмущенное движение, задаваемое гамильтонианом (2). По паутине ионно-молекулярные заряженные частицы перемещаются в радиальном направлении. Движение по радиусу ионно-молекулярных частиц возможно только по сепаратрисам. При этом движение будет замораживаться вблизи гиперболических точек.

Эти гиперболические области экспериментально хорошо выражены и прослеживаются на рис. 1 (а, б), где представлены аттракторы второго возвращения гелей оксигидрата циркония и смешанных гелей кремниевой кислоты и оксигидрата иттрия. Экспериментальное перекрывание сепаратрис (или их разрушение) ионно-молекулярных потоковых движений выражается в формировании стохастических (зачерненных) областей в фазовой плоскости. Это наблюдается и для токовых выплесков (рис. 1, а) и для колебательного изменения динамической вязкости (рис. 1, б). Образование стохастичной связности сепаратрис благоприятствует радиальной диффузии ионных потоков в геле и формированию связной паутины.

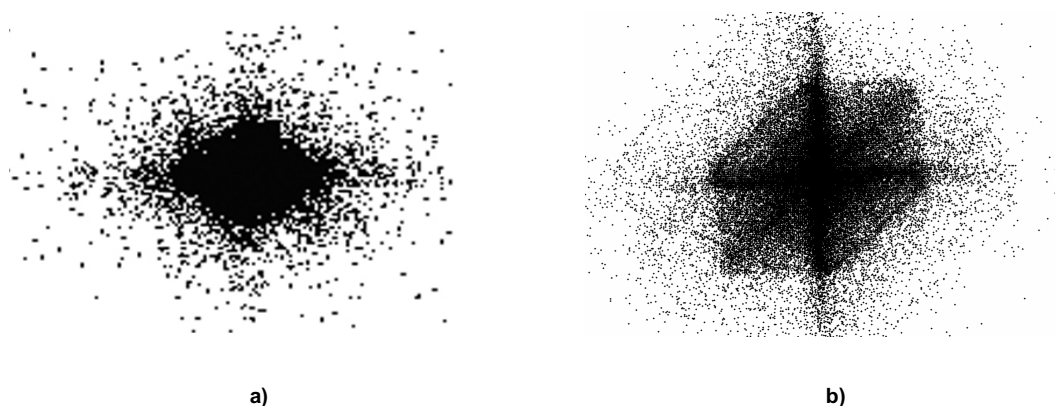


Рис. 1. Экспериментальное перекрывание сепаратрис ионно-молекулярных потоковых движений и формирование стохастических областей в фазовой плоскости для гелей оксигидрата циркония (а) и смешанной кремниевой кислоты (б), образующих аттракторы второго возвращения
 а) при этом возраст геля оксигидрата циркония составляет 32 суток, образец синтезирован при $pH = 9,25$, $n = 0,94$ моль, $L = 7$ см, $H = 0$ Э;
 б) смешанный гель кремниевой кислоты и оксигидрата иттрия синтезирован в соответствии с [3]

Примеры на рис. 6, 8, 9 демонстрируют сложную фрактальную структуру стохастической паутины.

Для гамильтониана (4) продвижения по радиусу не происходит. Если принять во внимание действие возмущения на ионно-молекулярные потоки

$$\tilde{V}(I, \theta, t) = \epsilon \frac{\omega_0^2}{k^2} \sum_{m \neq n_0} J_m(k\rho) \cos \left[\frac{m}{n_0} \theta - \left(1 - \frac{m}{n_0}\right) \nu t \right], \tag{5}$$

а для ρ использовать выражение $\rho = (2n_0 I / \omega_0)^{1/2}$, то при этих условиях сепаратрисы разрушаются и на их месте образуются каналы с конечной шириной, в которых происходит стохастическая динамика, то есть внутри паутины образуются инвариантные П-торы, вместо К-торов.

Что же происходит внутри П-торовой паутины? Если рассмотреть для простоты достаточно удаленные от центра паутины области, то есть $k\rho > 1$. Используя асимптотику функций Бесселя $J_n(k\rho) \sim (2/\pi k\rho)^{1/2} \cos(k\rho - \pi n/2 - \pi/4)$ выделим фиксированную ячейку паутины и опишем семейство траекторий внутри нее, сначала пренебрегая возмущением \tilde{V} . Тогда введенный гамильтониан

$$H_w = \omega_w \cos \xi \cos \theta, \tag{6}$$

где $\omega_w = -\sigma(2/\pi)^{1/2} \in n_0 \omega_0 / (k\rho_0)^{3/2}$, $\xi = k\tilde{\rho}$, можно считать гамильтонианом паутинных торов (П-торов). Величина ω_w является частотой малых колебаний для траекторий ионных потоков, обматывающих П-торы. На сепаратрисах $H_w = 0$. Тогда из (9) следует, что четыре сепаратрисы определяются уравнениями: $\cos \xi = 0$. $\xi = \pm \pi/2$; $\cos \theta = 0$; $\theta = \pm \pi/2$; Они соответствуют четырем сторонам квадрата в приближении $\tilde{\rho} \ll \rho_0$, рис.3. На двух горизонтальных сепаратрисах следует уравнение движения $\sin = \pm \text{th} [2|\omega_w|(t-t_0)]$; $\xi = \pm \pi/2$, а на двух вертикальных: $\sin = \pm \text{th} [2|\omega_w|(t-t_0)]$; $\theta = \pm \pi/2$.

Замкнутые траектории являются сечениями инвариантных торов (сечения Пуанкаре, рис. 2), если дополнить фазовое пространство (I, θ) переменной «время» обычным способом, учитывая периодическое по времени возмущение \tilde{V} . Инвариантные торы внутри паутины следует называть П-торами. **Отличие от КАМ-торов прослеживается в зависимости периода от ϵ ($T_w \sim 1/\epsilon$).**

В случае КАМ-торов $T \sim 1/\epsilon^{1/2}$.

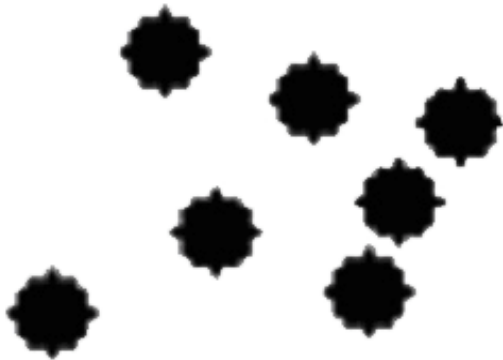


Рис. 2. Геометрия точечных множеств токовых выплесков образцов оксигидрата циркония

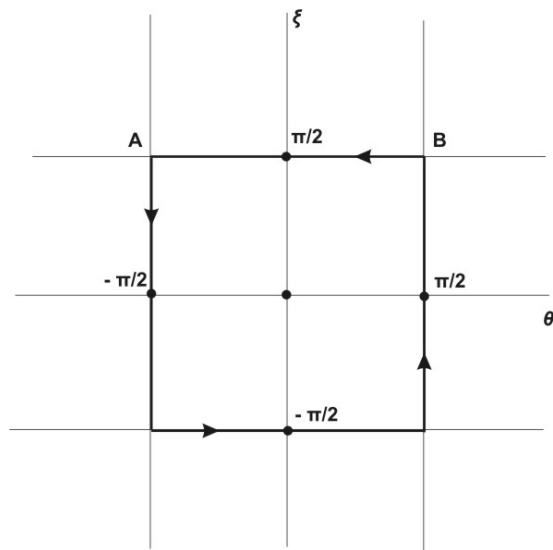


Рис. 3. Различные сепаратрисные ветви одной ячейки паутины

Как происходит разрушение сепаратрис и образование на их месте стохастической паутины? На участке траектории вблизи сепаратрисы АВ (рис. 3) имеем $k\tilde{\rho} = \pi/2$, $\cos(2k\tilde{\rho}) = -1$.

Тогда имеем:

$$\Delta\tilde{H}_0 = -2\pi^2 \frac{\omega_0^2}{k^2} \exp\left[-\frac{1}{\epsilon} \left(\frac{\pi}{2}\right)^{5/2} (k\rho_0)^{1/2}\right] \sin(\omega_0 t_0) . \quad (7)$$

Выражение (7) справедливо при движении частицы на участке вблизи одной из сепаратрис АВ (рис. 3).

На рис. 4 приведен экспериментально полученный вид клюва Арнольда на приведенных (выбранных) векторах параметров токовых выплесков оксигидратной системы циркония [10, с. 156]. На рис. 4 указаны направления *A*, *B* и *C*, отвечающие трем механизмам разрушения резонансного тора (и аттрактора, построенного на этих торах). На рисунке показаны следующие обозначения: l_0 – линия рождения торов; l_1 – линии касательной бифуркации циклов на торе, определяющие границы области синхронизации; l_2 – линия потери устойчивости резонансным циклом в области синхронизации; l_h – линия гомоклинического касания многообразий W^u и W^s [11]. В момент бифуркации длина инвариантной кривой в сечении тора становится бесконечной, то есть тор разрушается. При дальнейшем движении по направлению *A* может образоваться хаотический аттрактор либо в результате последовательности бифуркаций удвоения периода, либо через разрушение тора, родившегося на линии l_2 .

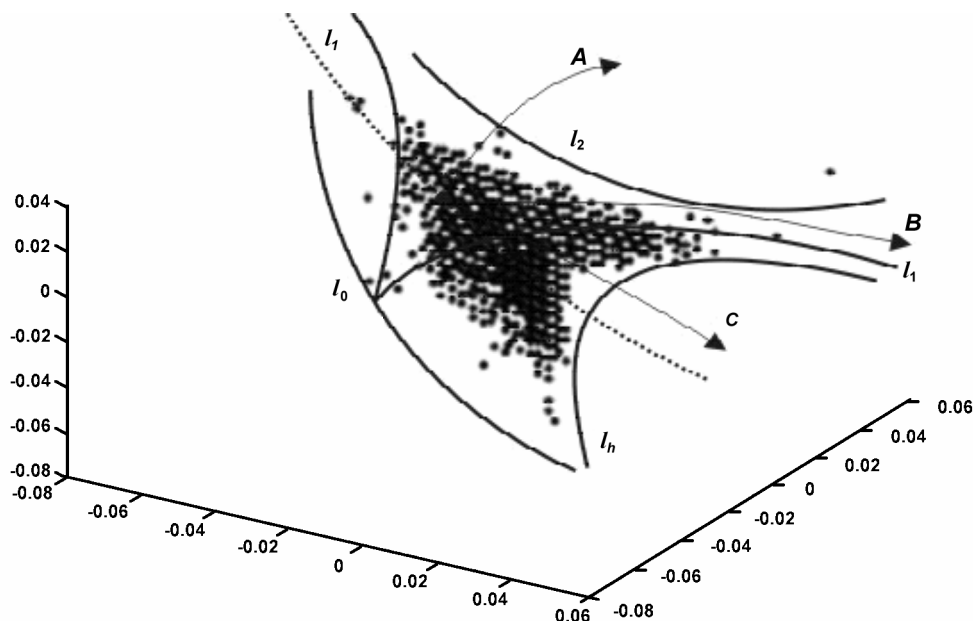


Рис. 4. Экспериментальный клюв Арнольда на приведенных (выбранных) векторах параметров токовых выплесков (амплитуд, *A*) оксигидратной системы циркония, определяющий механизм разрушения резонансных торов

При движении по направлению *B* неустойчивое многообразие седлового цикла W^u , образующее поверхность тора, искривляется по линии l_h , происходит его гомоклиническое касание с устойчивым многообразием W^s . В этот момент образуется негрубая гомоклиническая кривая Γ_0 , а тор T^2 разрушается. Таким образом, рассмотренные механизмы разрушения резонансного тора приводит к образованию в окрестности тора хаотического множества, которое может стать притягивающим (аттрактором или паутиной).

Выражение (7) одинаково на всех четырех ветвях ячейки в силу симметрии задачи. Меняются лишь моменты времени t_0 , определяющие положение частицы при прохождении середины участка орбиты вблизи каждой из четырех сепаратрис. Интервал времени между двумя последовательными прохождениями вблизи середин сепаратрис равен одной четверти периода, то есть $T(H_w)/4$. Это позволяет описать динамику системы внутри одной ячейки, соответствующую

гамильтониану \tilde{H}_0 ($\partial\tilde{H}_0/\partial I = 0$, $\partial\tilde{H}_0/\partial\theta = 0$), в виде отображения для переменных \tilde{H}_0 и $\psi = \omega(H_w)t$, где

$$\omega(H_w) = 2\pi / T(H_w) \tag{8}$$

есть частота нелинейных колебаний внутри сепаратрисной ячейки. Используя формулы (7) и (8), имеем отображение вблизи сепаратрис паутины

$$\begin{aligned} H_{n+1} &= \tilde{H}_n - 2n^2 \frac{\omega_0^2}{k^2} \exp\left[-\left(\frac{\pi}{2}\right)^{5/2} \frac{(k\rho_0)^{1/2}}{\epsilon}\right] \sin\psi_n, \\ \psi_{n+1} &= \psi_n - \left(\frac{\pi}{2}\right)^{3/2} \frac{(k\rho_0)^{1/2}}{\epsilon} \ln\left[4\epsilon \frac{\omega_0^2}{k^2} \left(\frac{2}{\pi k\rho_0}\right)^{1/2} \frac{1}{\tilde{H}_{n+1}}\right]. \end{aligned} \tag{9}$$

Условие стохастической динамики $K \equiv |\partial\psi_{n+1}/\partial\psi_n - 1| \geq 1$ определяет границу H_c стохастического слоя, образующегося в окрестности сепаратрис. Из уравнений (9) при условии $k=1$ получаем, что толщина стохастической паутины равна $2H_c$. Из анализа уравнений (9) следует, что она экспоненциально мала по параметру ϵ и экспоненциально убывает по мере удаления от центра паутины (рис. 5, 6).

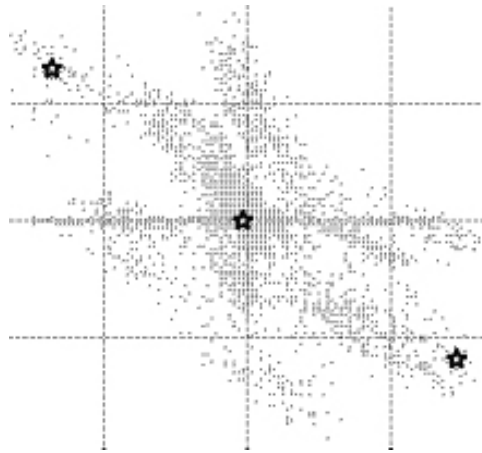


Рис. 5. Геометрия стохастической паутины оксигидрата циркония по токовым выплескам, где $pH = 9,00$, $L = 0,01$ см, $T = 286$ К, время экспозиции 2 ч (координаты рисунка те же, что и в [7, 8, 9])

Таким образом, различные П-торы отделены друг от друга стохастической паутиной. Она образует единую сетку с экспоненциально малой толщиной. В показателе экспоненты стоит множитель $1/\epsilon$, а не $1/\sqrt{\epsilon}$, как в случае паутины Арнольда. Кроме того, сужение паутины с ростом энергии ионно-молекулярных частиц, то есть по мере удаления от центра паутины, затрудняет диффузию по паутине на большие расстояния и практически обрезает ее.

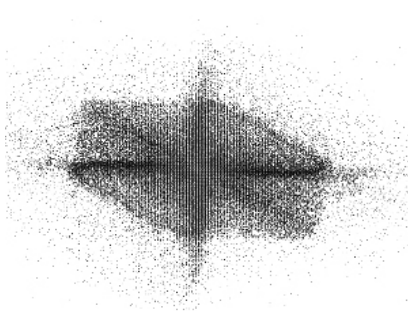


Рис. 6. Геометрия формирования стохастической паутины смешанного оксигидрата иттрия и кремниевой кислоты (по данным изменения динамической вязкости)



Рис. 7. Геометрия отображения второго возвращения оксигидрата циркония с подкручиванием (по данным токовых выплесков)

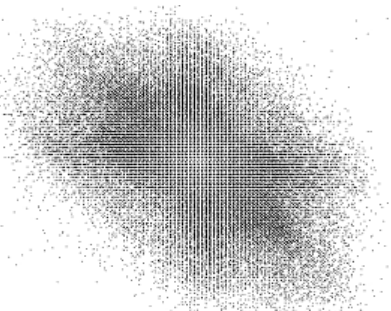


Рис. 8. Равномерная паутина смешанного геля кремниевой кислоты и оксигидрата иттрия

Рассмотрим паутину, когда ширина паутины в среднем не изменяется на всей фазовой плоскости. Такую паутину называют равномерной (рис. 8). Необходимо ввести новый вид отображения, сохраняющего меру, к которому нельзя непосредственно применить результаты КАМ-теории. Рассмотрим отображения с подкручиванием (рис. 7). Эта паутина возникает при анализе движения заряженных частиц (ионных потоков) в магнитном поле и поле перпендикулярного волнового пакета с большим числом гармоник.

Исходные уравнения движения частицы имеет вид:

$$r = \frac{(\ddot{x})}{m} \vec{E}(x, t) + \frac{e}{mc} [\dot{r} \vec{B}_0], \quad (10)$$

где $\vec{r} = (x, y)$ – вектор, лежащий в плоскости (x, y) , \vec{E} – волновой пакет, распространяющийся вдоль оси x и направленный вдоль x , \vec{B}_0 – постоянное магнитное поле, направленное вдоль оси z . Отсутствие зависимости правой части (10) от y приводит к интегралу движения $\dot{y} = v_y = -\omega_0 x + \text{const}$, где $\omega_0 = eB_0/(mc)$ есть циклотронная частота. Без ограничения общности можно положить $\text{const} = 0$ и тогда

$$\dot{y} = -\omega_0 x. \quad (11)$$

Для волнового пакета

$$\vec{E} = -\vec{E}_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \sin(kx - \omega t - nvt) = -\vec{E}_0 T \sin(kx - \omega t) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - nT), \quad (12)$$

где \vec{E}_0 направлено вдоль x и $T = 2\pi/\nu$. Тогда уравнение (10) с учетом (11) и (12) записывается так:

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = -\frac{e}{m} E_0 T \sin(kx - \omega t) \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(t - nT). \quad (13)$$

Уравнение описывает линейный осциллятор, на который действуют короткие (δ -образные) толчки с периодом T (толчки конформных перестроений коллоидно-химической системы). Для перехода к разносным уравнениям введем обозначения:

$x_n = x(t_n - 0)$, $\dot{x}_n = v_{x,(n)} = \dot{x}_x(t_n - 0)$. Соотношения между величинами x , \dot{x} слева и справа от

δ -функции имеют вид: $x(t_n + 0) = x(t_n - 0)$, $\dot{x}(t_n + 0) = \dot{x}(t_n - 0) - \frac{e}{m} TE_0 \sin(kx_n - \omega t_n)$, где $t_n = nT$.

Эти соотношения приводят к следующему стандартному отображению при $\omega_0 \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} v_{x,(n+1)} &= v_{x,(n)} + (e/m) E_0 T \sin(kx_n), \\ x_{n+1} &= x_n + T(v_{x,(n+1)} - \omega/k). \end{aligned} \quad (14)$$

Для этого отображения глобальный хаос возникает при условии

$$K = (e/m) E_0 k T^2 \geq 1. \quad (15)$$

При $K \ll 1$, как показано ранее, в фазовом портрете узкие стохастические слои отделены друг от друга инвариантными кривыми, препятствующими диффузии. Свойства отображения (14) совсем иные. Наличие слагаемого в y уравнениях $\omega T \neq 2\pi m$, где m – целое число, в аргументе синуса уравнений (13), (14) имеет простой физический смысл. Если сделать замену $\tilde{x} = x - \omega t/k$, то из (14) следует, что частицы ускоряются. Изменение скорости на одном конформном толчке равно $\omega \omega_0 T/k$. Поэтому за время t скорость изменится на величину $\Delta v \sim \omega_0 t(\omega/k)$, где ω/k – фазовая скорость волнового пакета. Ускорение обусловлено тем, что волна регулярно «подталкивает» частицу. Если положим $\omega = 0$, то есть исключим возможность постоянного ускорения, то

$$\alpha = \omega_0 T. \quad (16)$$

Введем новые безразмерные переменные $u = kv_x/\omega_0$, $v = kv_y/\omega_0 = kx$. Тогда уравнение (11) переходит в следующее отображение:

$$\widehat{M}_\alpha : \begin{cases} \bar{u} = (u + K_0 \sin v) \cos \alpha + v \sin \alpha, \\ \bar{v} = -(u + K_0 \sin v) \sin \alpha + v \cos \alpha, \end{cases} \quad (17)$$

где индексы n и $n+1$ для простоты записи опущены, а $K_0 = K/\alpha$. **Отображение \widehat{M}_α называется отображением с подкручиванием на угол α** . В безразмерных переменных u, v гамильтониан задачи движения (13) при $\omega = 0$ имеет вид

$$H = \frac{\alpha}{2}(u^2 + v^2) - K_0 \cos v \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\tau - n), \quad (18)$$

$\tau = t/T$ – безразмерное время и уравнения движения записываются следующим образом:

$$\frac{du}{d\tau} = \frac{\partial H}{\partial v} = \alpha v + K_0 \sin v \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\tau - n), \quad (19)$$

$$\frac{dv}{d\tau} = -\frac{\partial H}{\partial u} = -\alpha u.$$

В переменных u, v, τ осциллятор имеет частоту α , а толчки следуют через интервалы времени $\Delta\tau = 1$. Резонанс в системе возникает тогда, когда за один период колебания осциллятора $2\pi/\alpha$ происходит целое число толчков q . Условием этого является равенство $2\pi/\alpha_q = q$.

Или

$$\alpha_q = 2\pi/q. \quad (20)$$

Резонансное условие (23) эквивалентно следующему $q\omega_0 = 2\pi/T$. **Частота возмущения** равна $\nu = 2\pi/T$. Отображение \widehat{M}_q в этом случае получается из \widehat{M}_α , если в (17) подставить значение (20) для α :

$$\widehat{M}_q : \begin{cases} \bar{u} = (u + K_0 \sin v) \cos(2\pi/q) + v \sin(2\pi/q), \\ \bar{v} = -(u + K_0 \sin v) \sin(2\pi/q) + v \cos(2\pi/q). \end{cases} \quad (21)$$

Рассмотрим некоторые частные случаи для \widehat{M}_q .

При $q=1$ (один толчек конформера)

$$\widehat{M}_1 : \begin{cases} \bar{u} = u + K_0 \sin v, \\ \bar{v} = v. \end{cases} \quad (22)$$

Отсюда:

$$v = \text{const} = v_0, \quad u_n = u_0 + K_0 n \sin v_0. \quad (23)$$

Отображение \widehat{M}_1 соответствует случаю основного циклотронного резонанса ($\omega_0 = \nu$), а решение (20) описывает ускорение вдоль оси x и n играет роль дискретного времени ($n = t/T$). При $q=2$ (двухтолчковая система) имеем из (18)

$$\widehat{M}_2 : \begin{cases} \bar{u} = -u - K_0 \sin v, \\ \bar{v} = -v. \end{cases} \quad (24)$$

Этот случай соответствует полуполному циклотронному резонансу. Два последовательных отображения $\widehat{M}_2 \widehat{M}_2 = \widehat{M}_2^2$:

$$\widehat{M}_2^2 : \begin{cases} \bar{u} = -\bar{u} - K_0 \sin \bar{v} = u + 2K_0 \sin v, \\ \bar{v} = -\bar{v} = v. \end{cases}$$

Это выражение совпадает с (19) и поэтому имеет тоже решение (20), описывающее ускорение частиц. Начиная с $q > 2$ система (21) уже не является интегрируемой и ее анализ усложняется. Рассмотренные случаи резонанса $q=1, 2$ оказались очень простыми, то есть допускают точные решения.

Периодическая паутина.

Рассмотрим резонансы с $q = 3, 4$, и 6. Положим в (21) $q = 4$:

$$\widehat{M}_4 : \begin{cases} \bar{u} = v, \\ \bar{v} = -u - K_0 \sin v. \end{cases} \quad (25)$$

Гамильтониан, соответствующий отображению \widehat{M}_4 , может быть получен из (21):

$$H = \omega_4(u^2 + v^2) - K_0 \cos v \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\tau - n); \quad (26)$$

$$\omega_4 = \pi / 4.$$

Фазовый портрет отображения \widehat{M}_4 приведен на рис. 9. На фазовой плоскости имеется неограниченная паутина, то есть область стохастической коллоидно-химической динамики, вероятно, должна выглядеть аналогично. Внутри ячеек паутины основная часть семейства орбит представляет собой замкнутые периодические траектории, являющиеся сечениями инвариантных торов. При малых значениях K_0 паутина является тонкой и имеет вид, близкий к квадратной решетке. С ростом K_0 область стохастической динамики растет. Размер островков устойчивости внутри ячеек уменьшается, однако их расположение по-прежнему сохраняет симметрию квадратной решетки (см. рис. 3).



Рис. 9. Отображения оксигидрата циркония с подкручиванием, образование равномерной паутины

Внутри каждого из малых островков имеется субструктура, зависящая от значений K_0 . Итерация (25) имеет вид

$$\widehat{M}_4^4 : \begin{cases} \bar{u} = u + 2K_0 \sin v, \\ \bar{v} = v - 2K_0 \sin u. \end{cases} \quad (27)$$

Отображение (27) записано в форме, при которой оно сохраняет меру. Интервал времени между двумя последовательными шагами отображения \widehat{M}_4^4 равен 4. Если записать для отображения (27) соответствующий гамильтониан H_4 и соответствующие ему уравнения движения \dot{u}, \dot{v} :

$$\begin{aligned} \dot{u} &= \frac{\partial H_4}{\partial v} = -\frac{1}{2} K_0 \sin v, \\ \dot{v} &= -\frac{\partial H_4}{\partial u} = -\frac{1}{2} K_0 \sin u \sum_{i=1}^n \delta\left(\frac{\tau}{4} - n\right). \end{aligned} \quad (28)$$

Если выделить в гамильтоновой сумме H_4 член с $n=0$, то первый член в гамильтониане H_4 описывает нелинейные колебания с гамильтонианом $H_4^{(0)}$:

$$H_4^{(0)} = -\Omega_4(\cos v + \cos u) = -2\Omega_4 \cos\left(\frac{u+v}{2}\right) \cos\left(\frac{u-v}{2}\right) \quad (29)$$

и с частотой $\Omega_4 = K_0/2$. Второй член в H_4 можно рассматривать (по аналогии с (2)) как возмущение:

$$V_4 = -\Omega_4 \cos u \sum_{\substack{n=-\infty \\ n \neq 0}}^{\infty} \cos\left(\frac{\pi n \tau}{2}\right). \quad (30)$$

Минимальная частота гармоник, входящих в V_4 , равна 4. Поскольку по определению $\Omega_4 \ll 4$, то возмущение является высокочастотным, то его влияние оказывается малым.

Достаточно ограничиться в (30) лишь гармониками с $n = \pm 1$, то есть положить

$$V_4 \approx -2\Omega_4 \cos u \cos(\pi\tau/2). \quad (31)$$

Движение, описываемое гамильтонианом (29), позволяет получить следующие уравнения движения:

$$\dot{u} = \Omega_4 \sin v, \quad \dot{v} = \Omega_4 \sin u. \quad (32)$$

Систему уравнений (35) можно записать в виде одного уравнения

$$\ddot{u} + \Omega_4^2(C \sin u - 1/2 \sin 2u) = 0, \quad (33)$$

где величина $C = \cos u + \cos v$ представляет собой безразмерный интеграл энергии.

Устойчивым положениям равновесия (эллиптическим точкам) соответствуют значения

$$|C| = 2. \quad v = \pi n, \quad u = \pi m \quad m + n = 2l \quad (l = 0, \pm 1, \dots);$$

неустойчивым положениям равновесия (гиперболические точки) соответствуют значения

$$C = 0. \quad v = \pi n, \quad u = \pi m \quad m + n = 2l + 1 \quad (l = 0, \pm 1, \dots);$$

Сепаратрисы, проходящие через гиперболические точки, покрывают фазовую плоскость квадратной сеткой, определяемой уравнениями

$$v = \pm(u + \pi) + 2\pi l \quad (l = 0, \pm 1, \dots) \quad (34)$$

Траектории внутрисепаратрисных ячеек находятся интегрированием уравнений (32) и (33). Это дает при $|C| \leq 2$

$$\begin{aligned} \cos v &= 1/2C + (1 - 1/2C)cd[(1 + 1/2C)\Omega_4\tau; k], \\ \cos u &= 1/2C - (1 - 1/2C)cd[(1 + 1/2C)\Omega_4\tau; k], \end{aligned} \quad (35)$$

где $k = (2 - C)/(2 + C)$ и $cd = cn/dn$ – отношение эллиптических функций Якоби. Траектории, описываемые системой (32), представляют собой замкнутые орбиты. Период нелинейных колебаний равен

$$T(C) = \frac{8}{\Omega_4(1 + C/2)}K(k), \quad (36)$$

где $K(k)$ – полный эллиптический интеграл первого рода. При $C \rightarrow 2$ из (36) получаем $T(2) = 2\pi/\Omega_4$. Учет возмущения (31) приводит к слабой модуляции всей структуры на фазовой плоскости.

Она хорошо видна на рис.7, 9. Однако наиболее сильное влияние возмущения проявляется вблизи сепаратрисы, так как приводит к ее разрушению и к образованию стохастической паутины.

Для этого следует рассмотреть высокочастотное возмущение (31), действующее на основное движение (29). Оно приводит к образованию экспоненциально узкого стохастического слоя толщиной порядка $\exp(-\text{const}/K_0)$. Это и есть толщина паутины. Существование неограниченной паутины имеет те же следствия, что и в случае диффузии Арнольда. Она имеет равномерную толщину во всем фазовом пространстве и, следовательно, примерно одинаковую скорость диффузии.

Резонансное условие $\omega_4 = \pi/2$ играет исключительную роль в образовании паутины. Если это условие не выполняется точно, то уже в нулевом приближении не возникает единой сепаратрисной сетки. Внутри ячеек сепаратрисы имеется своя система инвариантных кривых, островков и сепаратрис. Последние отделены от основной сети инвариантными кривыми. Поэтому фазовый портрет внутри ячеек во многом напоминает ситуацию в случае, когда применима КАМ-теория. Вид фазового портрета во многом зависит от величины K_0 . Увеличение K_0 приводит к уменьшению ячейки паутины. Одновременно внутри нее происходят бифуркации деления и образования ожерелий из различного числа островков меньшего размера.

Отображение (20) всегда имеет стационарную нулевую точку ($u = 0, v = 0$). Рассмотрим матрицу:

$$\widehat{M}'_{\alpha}(0,0) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & K_0 \cos \alpha + \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha - K_0 \sin \alpha \end{pmatrix}.$$

Собственные значения λ матрицы $\widehat{M}'_{\alpha}(0,0)$ удовлетворяют уравнению:

$$\lambda^2 - \lambda Sp \widehat{M}'_{\alpha} + 1 = 0.$$

Точка $(0,0)$ становится неустойчивой при $|Sp \widehat{M}'_{\alpha}| > 2$, то есть при $K_0 > 2 \operatorname{ctg}(\alpha/2)$.

При $\alpha = \alpha_4 = \pi/2$ условие неустойчивости имеет вид $K_0 > 2$. Неустойчивость проявляется в том, что эллиптическая точка $(0,0)$ превращается в гиперболическую. $K_0 > 2$ Одновременно рождаются две новых эллиптических точки. Это обычная бифуркация удвоения островков (рис. 10). Внутри островка можно видеть новый стохастический слой, образующийся на месте сепаратрисы, проходящей через седло $(0,0)$. Это очень хорошо видно на экспериментально полученном коллоидно-химическом аттракторе, полученном на геле оксигидрата циркония. Бифуркация удвоения не исчерпывает разнообразия бифуркационной картины в отображении (25). При бифуркациях удвоения возникают и отщепляются ожерелья из островков, соответствующих резонансам высоких порядков.

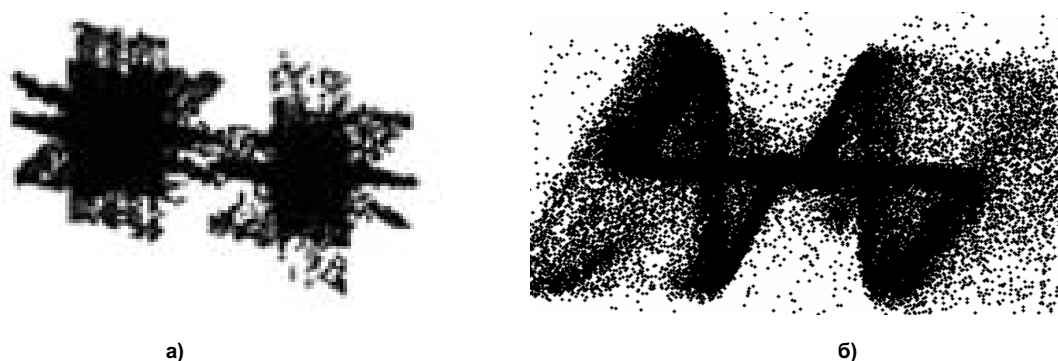


Рис. 10. Бифуркация удвоения островков (аттракторов) в результате рождения эллиптических точек в гелях оксигидрата циркония (получено по результатам токовых выплесков), а также смешанных гелей кремниевой кислоты и оксигидрата иттрия (получено по измерению динамической вязкости)

Выводы

Показано перманентное структурирование оксигидратных систем циркония, перемежаемое формированием областей равномерной паутины. Установлена близость концепции слабого хаоса экспериментально обнаруженным нелинейными свойствами оксигидратных гелевых систем, в которых наблюдается сложная система движения, как линейно-перемещательного и колебательно-вращательного крупных макромолекулярных образований (микроэлектрофорез), так и ионного потокового направленного колебательного перемещения внутри или вокруг них. Это обнаруживается при наблюдении изменений вязкостных характеристик гелей, а также при обнаружении совершенно замечательного свойства оксигидратных гелей – пульсационного выплеска ионных потоков.

Литература

1. Сухарев Ю.И. Нелинейность гелевых оксигидратных систем / Ю.И. Сухарев, Б.А. Марков. – Екатеринбург: УрО РАН, 2005. – 468 с.
2. Фридрихсберг, Д.А. Курс коллоидной химии / Д.А. Фридрихсберг. – СПб.: Химия, 1995. – С. 243–245.
3. Сухарев, Ю.И. Аттракторы Лоренца в коллоидно-химических системах и их роль в фазовом течении оксигидратных гелей / Ю.И. Сухарев, К.И. Носов, Т.Г. Крупнова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия» – 2007. – Вып. 8 – № 3 (75) – С. 95–99.

4. Слабый хаос и квазирегулярные структуры / Г.М. Заславский, Р.З. Сагдеев, Д.А. Усиков, А.А. Черников. – М.: Наука, 1991. – 235 с.
5. Spontaneous pulsating current in zirconium oxyhydrate gels / Yu.I. Sukharev, B.A. Markov, A.Yu. Prokhorova, I.Yu. Lebedeva // WSEAS TRANSACTIONS ON CIRCUITS AND SYSTEMS Issue 11, Vol. 4, November 2005 ISSN: 1109-2734. – PP. 1477 – 1484.
6. Электрофоретические исследования периодических сорбционных характеристик оксигидрата иттрия и циркония / Ю.И. Сухарев, И.Ю. Сухарева, А.М. Кострюкова, А.Г. Рябухин // Известия Челябинского научного центра УрО РАН, 2003. – № 4. – С. 121–124.
7. Сухарев, Ю.И. Коллоидно-химический вариант механизма диффузии Арнольда / Ю.И. Сухарев // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2007. – Вып. 8. – № 3(75). – С. 89–94.
8. Экспериментальная установка для регистрации токовых выплесков гелевых оксигидратных систем / Ю.И. Сухарев, Л.А. Озеров, А.Ю. Орлова, Т.Г. Крупнова // Известия Челябинского научного центра УрО РАН, 2006.
9. Concerning the interconnections of self-organizing oxyhydrate gels and their experimental determination / Yuri I. Sukharev, T.G. Krupnova, E.P. Yudina, I.Yu. Lebedeva // Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects 2007. – 300. – P. 281–286.
10. Нелинейные эффекты в хаотических и стохастических системах / В.С. Анищенко, В.В. Астахов, Т.К. Владивасова и др. – Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003. – 544 стр.
11. Малинецкий, Г.Г. Современные проблемы нелинейной динамики / Г.Г. Малинецкий, А.Б. Потапов. – Москва: УРСС, 2002. – 357 с.

Поступила в редакцию 3 сентября 2007 г.

ТЕРМИЧЕСКОЕ РАСШИРЕНИЕ $\text{Na}_2\text{ZnV}_2\text{O}_7$

А.Н. Чванова, Т.И. Красненко, М.В. Ротермель, В.В. Викторов

Исследовано термическое расширение структуры двойного пированадата натрия-цинка $\text{Na}_2\text{ZnV}_2\text{O}_7$ в интервале температур 30–600 °С. Показано, что коэффициенты термического расширения параметров кристаллической решетки не меняются с ростом температуры. Наблюдается расширение структуры вдоль оси c , при этом в плоскости $a1a2$ структура становится более компактной. Определена роль ионов натрия в термических деформациях пированадата цинка.

Одной из наиболее важных служебных характеристик материалов, используемых в современной технике, является коэффициент термического расширения (КТР). В работе исследовано термическое поведение двойного пированадата натрия-цинка. $\text{Na}_2\text{ZnV}_2\text{O}_7$ кристаллизуется в тетрагональной сингонии, пр. гр. $P-42_1m$ с параметрами $a = 8,2711(4) \text{ \AA}$, $c = 5,1132(2) \text{ \AA}$, $Z = 2$ [1]. Структура $\text{Na}_2\text{ZnV}_2\text{O}_7$ образована слоями соединённых по вершинам тетраэдров VO_4 и ZnO_4 . Межслоевое пространство занимают искажённые квадратные антипризмы NaO_8 . Проекция структуры $\text{Na}_2\text{ZnV}_2\text{O}_7$ на различные плоскости представлена на рис. 1.

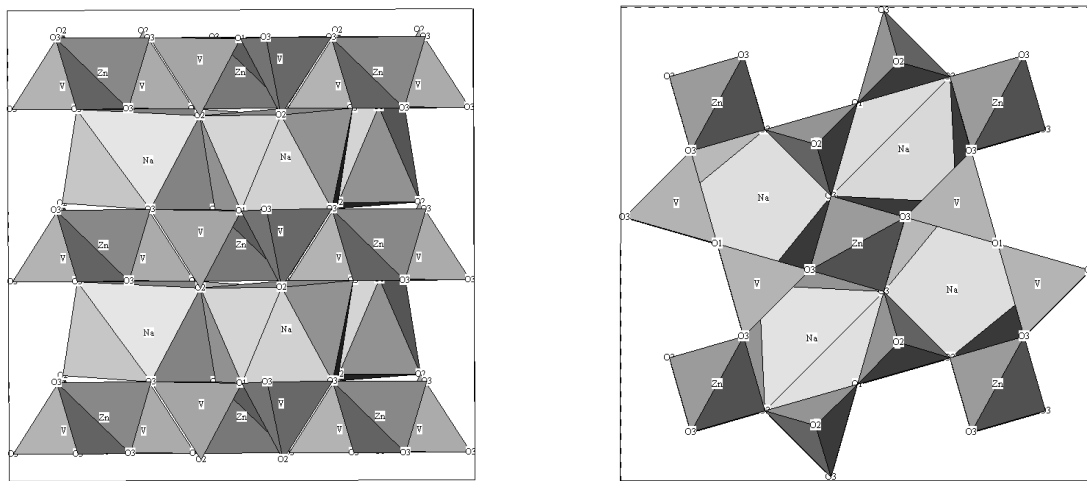


Рис. 1. Проекция кристаллической структуры $\text{Cd}_2\text{V}_2\text{O}_7$ на плоскости $a1c$ (слева) и $a1a2$ (справа)

Политермы параметров элементарной ячейки $\text{Na}_2\text{ZnV}_2\text{O}_7$ в интервале температур от комнатной до 600 °С приведены на рис. 2. Расширение структуры резко анизотропно, коэффициент термического расширения (КТР) вдоль оси c на порядок выше, чем вдоль оси a : $\alpha_a = 8 \cdot 10^{-6} 1/K$, $\alpha_c = 31 \cdot 10^{-6} 1/K$, $\alpha_V = 46 \cdot 10^{-6} 1/K$. КТР остаются неизменными на всем исследуемом интервале температур.

Расчёт межатомных расстояний $M - O$, где $M = \text{Zn}, \text{Na}, \text{V}$, показал, что с ростом температуры они увеличиваются с различными КТР. Наибольшим изменениям подвержены длины связей и углы, лежащие в плоскости $a1a2$. Внутри слоя $[\text{ZnV}_2\text{O}_7]$ уменьшение межполиэдрических углов $O - O_{\text{мост}} - O$, $V - O - V$ и $\text{Zn} - O - V$ составляет $\sim 0,5^\circ$, что вызывает разворот тетраэдрической сети в плоскости $a1a2$ (рис. 3). Увеличение углов между слоями полиэдров $\text{Na} - O - V$ и $\text{Na} - O - \text{Zn}$ на $0,27 \pm 0,03^\circ$ приводит к вытягиванию структуры вдоль оси c .

Таким образом, высокотемпературные рентгенографические исследования позволили проанализировать термические трансформации структуры двойного пированадата натрия-цинка с точки зрения его полиэдрического представления. Установлено, что расширение кристаллической решетки $\text{Na}_2\text{ZnV}_2\text{O}_7$ вдоль оси c происходит за счет термических трансформаций натрий-

кислородных полиэдров, трансформации структуры в целом обусловлены преимущественными изменениями цинк-ванадий-кислородной подрешётки.

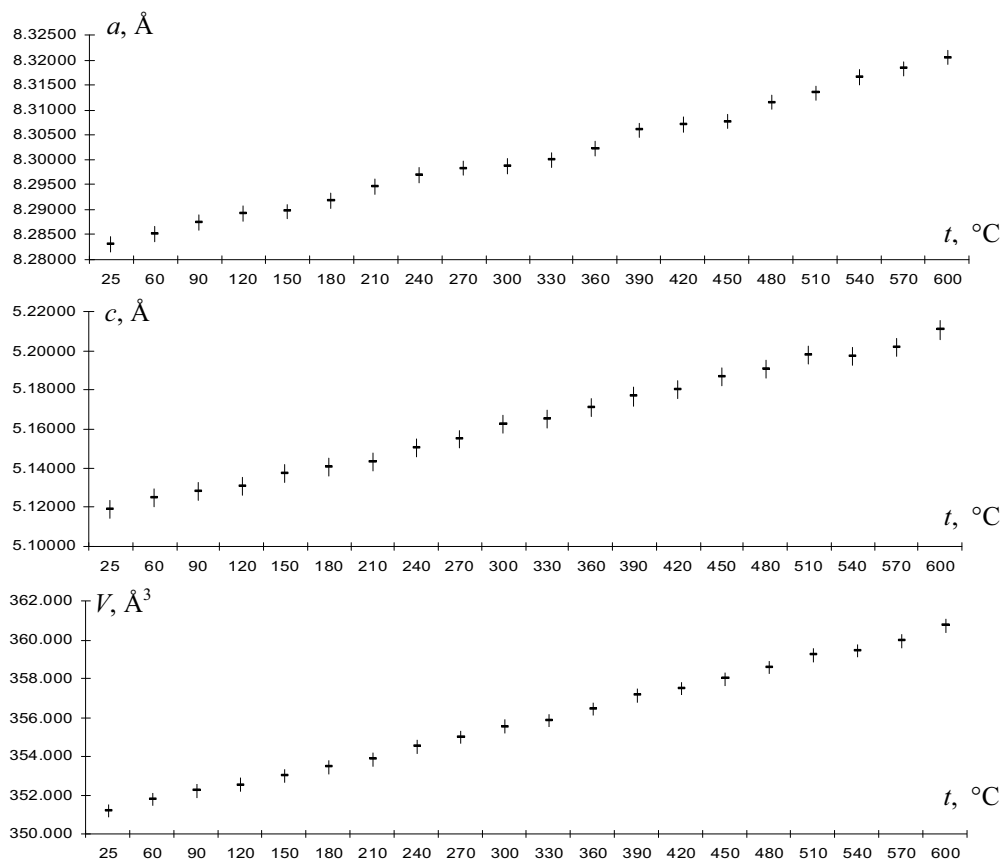


Рис. 2. Политермы параметров кристаллической решетки $\text{Na}_2\text{ZnV}_2\text{O}_7$

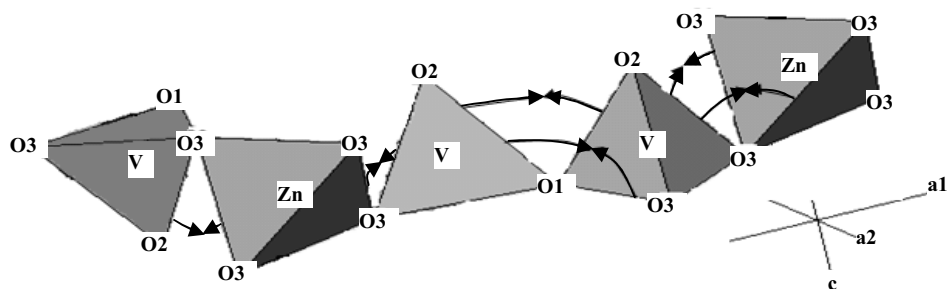


Рис. 3. Трансформации слоя $[\text{ZnV}_2\text{O}_7]$ в плоскости a_1a_2

Работа выполнена при поддержке гранта ректора ЧГПУ профессора Латюшина В.В.

Литература

1. Synthesis and crystal structure of the pyrovanadate $\text{Na}_2\text{ZnV}_2\text{O}_7$ / A.P. Tyutyunnik, V.G. Zubkov, L.L. Surat, V.V. Slobodin, G. Svensson. – Powder Diffraction. – 2005. – V.20, №3.

Поступила в редакцию 19 сентября 2007 г.

ТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ФАЗ СИСТЕМЫ $Zn_2V_2O_7 - Cu_2V_2O_7$

А.Н. Чванова, М.В. Ротермель, Т.И. Красненко,
О.В. Сивцова, В.В. Викторов

Методами дифференциально-термического и высокотемпературного рентгенофазового анализа исследован фазовый состав системы $Zn_2V_2O_7 - Cu_2V_2O_7$ в субсолидусной области. Определены границы областей существования твердых растворов на основе всех модификаций пированадатов меди и цинка, установлен их характер плавления.

В последние годы обнаружены и интенсивно исследуются сложные оксидные соединения с близким к нулевому и отрицательным коэффициентом объемного термического расширения (ОКОТР). Их применение возможно в устройствах, работающих в условиях перепада температур и термических ударов. Однако близкое к нулевому и отрицательное объемное термическое расширение материалов при температурах выше комнатной и нормальном давлении встречается довольно редко и характеризуется как аномальное. Нами обнаружено, что ОКОТР присущ пированадатам меди $Cu_2V_2O_7$ и цинка $Zn_2V_2O_7$. Материаловедческий интерес, как к данным соединениям, так и к твердым растворам на его основе определили цель настоящего исследования: изучение взаимной растворимости пированадатов меди и цинка и термических свойств твердых растворов на их основе методами рентгенофазового и дифференциально-термического анализов.

Конгруэнтное плавление $Cu_2V_2O_7$ происходит, согласно [1], при 780 °С, что не совпадает с мнением авторов [2], полагающих, что пированадат меди плавится с разложением при 740 °С. Исследования, проведенные в [3] показали, что в интервале температур от комнатной до 770 °С пированадат меди кристаллизуется в трех полиморфных модификациях – $\alpha-Cu_2V_2O_7$, $\beta'-Cu_2V_2O_7$ и $\beta-Cu_2V_2O_7$, одна из которых, $\beta-Cu_2V_2O_7$, является метастабильной и образуется при охлаждении от температур выше температуры фазового $\alpha \rightarrow \beta'$ перехода 715 ± 5 °С. Низкотемпературная α -модификация пированадата меди принадлежит орторомбической сингонии, пр. гр. $Fdd2$ [4], высокотемпературная $\beta'-Cu_2V_2O_7$ [3], также как и закалочная β -фаза [5], кристаллизуется в моноклинной сингонии, пр.гр. $C2/c$. Плавящийся конгруэнтно при 890 °С $Zn_2V_2O_7$, претерпевает фазовый переход I рода при 610 ± 5 °С [6, 7], кристаллизуясь ниже этой температуры в моноклинной сингонии, пр. гр. $C2/c$, $\alpha-Zn_2V_2O_7$ [8], выше – также в моноклинной сингонии, но с пр.гр. $C2/m$, $\beta-Zn_2V_2O_7$ [9]. Сходство всех структурных модификаций $Zn_2V_2O_7$ и $Cu_2V_2O_7$ состоит в том, что ванадий-кислородные тетраэдры соединены попарно общим атомом кислорода, причем угол $V - O_{\text{мост}} - V$ равен 180° для $\beta-Zn_2V_2O_7$ (структура тортвейтита), в остальных случаях он меньше развернутого (структура бихромата калия).

Необходимо отметить некоторые особенности синтеза пированадата меди: однофазные образцы низкотемпературной $\alpha-Cu_2V_2O_7$ могут быть получены твердофазным способом при изотермическом отжиге при температурах, не превышающих температуру фазового $\alpha \rightarrow \beta'$ перехода, с последующим медленным (2°/мин) охлаждением [10–13]. Формирование $\beta-Cu_2V_2O_7$ происходит при быстром охлаждении от температур существования $\beta'-Cu_2V_2O_7$ либо предварительно синтезированной $\alpha-Cu_2V_2O_7$, либо прокаленной при 730 – 750 °С в течение 10 часов стехиометрической смеси оксидов меди (II) и ванадия (V) [5, 12, 14].

Информация о фазовой диаграмме системы $Zn_2V_2O_7 - Cu_2V_2O_7$ в литературе отсутствует. Прологом для ее построения могут служить фрагментарные сведения о формировании твердых растворов на основе исходных ванадатов. Протяжённость твердого раствора на основе α -модификации $Cu_2V_2O_7$ по данным [15] составляет 7 мол.% $Zn_2V_2O_7$, область гомогенности $\alpha-Zn_{2-2x}Cu_{2x}V_2O_7$ при комнатной температуре ограничена 35 мол.% $Cu_2V_2O_7$ [16]. Исследования, проведенные при повышенных температурах показали, что до 700 °С атомы цинка практически не замещают атомов меди в $\beta-Cu_2V_2O_7$, тогда как замещение в $\alpha-Zn_2V_2O_7$ достигает 85 мол.% $Cu_2V_2O_7$ [17]. Дальнейшее повышение температуры приводит к образованию непрерывного твердого раствора замещения со структурой тортвейтита, пр.гр. $C2/c$. Однако в [18] показано, что серия твердых растворов является непрерывной уже при комнатной температуре. Необходимо от-

метить, что образцы $Cu_{2-2x}Zn_{2x}V_2O_5$ в [18] были получены при температурах синтеза выше фазового перехода при $(715 \pm 5)^\circ C$, расплавлены и затем закалены. Учитывая возможность инконгруэнтного плавления пированадата меди [2] и твердых растворов на его основе, интерпретация результатов авторов [18] может быть неоднозначной. В [17] также сообщается, что плавление образцов твердых растворов $Cu_{2-2x}Zn_{2x}V_2O_5$ сопровождается потерей кислорода.

Синтез образцов твердых растворов $Cu_{2-2x}Zn_{2x}V_2O_7$ осуществляли твердофазным методом из $\alpha-Cu_2V_2O_7$ и $\alpha-Zn_2V_2O_7$ при температуре отжига $650^\circ C$. Последние получали из оксидов CuO (ос.ч.), ZnO (ос.ч.) и V_2O_5 (ос.ч.), взятых в необходимых пропорциях по описанной выше методике и [19]. Образцы идентифицировали рентгенографически.

Для определения областей гомогенности твердых растворов системы $Cu_2V_2O_7 - Zn_2V_2O_7$ синтезировано 15 образцов с переменным шагом. Шаг 2,5 мол.% был выбран для составов, прилегающих к исходным пированадатам и в областях, где, согласно [15–17], проходит граница раздела фаз между бихроматотоподобными структурами. Остальные образцы синтезированы с шагом 10 мол.%.

Согласно данным РФА (рис. 1), при комнатной температуре образцы с содержанием от 2,5 до 30 мол.% $Cu_2V_2O_7$ принадлежат структуре $\alpha-Zn_2V_2O_7$. Интервал концентраций от 35 до 92,5 мол.% $Cu_2V_2O_7$ является областью гомогенности твердого раствора на основе $\beta-Cu_2V_2O_7$. Разрыв смесиности α -модификации $Zn_2V_2O_7$ и $\beta-Cu_2V_2O_7$ происходит вблизи состава с содержанием 32 ± 2 мол.% $Cu_2V_2O_7$. Образец твердого раствора, содержащий 2,5 мол.% $Zn_2V_2O_7$, кристаллизуется в структуре $\alpha-Cu_2V_2O_7$.

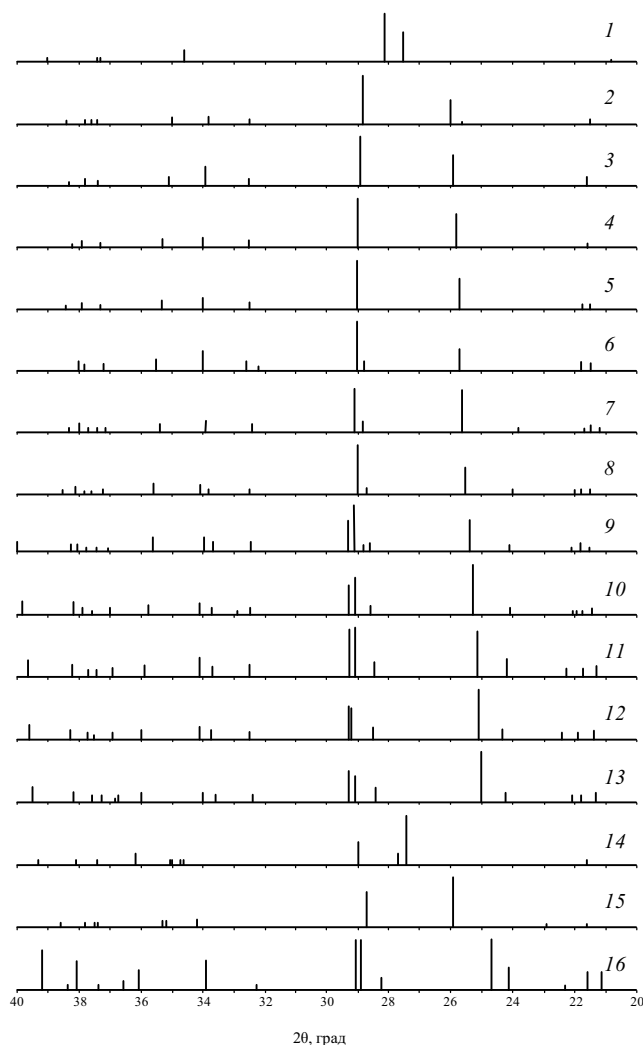


Рис. 1. Дифрактограммы образцов твердых растворов системы $Cu_2V_2O_7 - Zn_2V_2O_7$ при комнатной температуре:

- 1 – $\beta-Zn_2V_2O_7$; 2 – $\alpha-Zn_2V_2O_7$; 3 – 10 мол. % $Cu_2V_2O_7$;
- 4 – 20 мол. % $Cu_2V_2O_7$; 5 – 30 мол. % $Cu_2V_2O_7$;
- 6 – 35 мол. % $Cu_2V_2O_7$; 7 – 40 мол. % $Cu_2V_2O_7$;
- 8 – 50 мол. % $Cu_2V_2O_7$; 9 – 60 мол. % $Cu_2V_2O_7$;
- 10 – 70 мол. % $Cu_2V_2O_7$; 11 – 80 мол. % $Cu_2V_2O_7$;
- 12 – 85 мол. % $Cu_2V_2O_7$; 13 – 90 мол. % $Cu_2V_2O_7$;
- 14 – $\alpha-Cu_2V_2O_7$; 15 – $\beta'-Cu_2V_2O_7$ ($740^\circ C$ in situ); 16 – $\beta-Cu_2V_2O_7$

на основе $\beta-Cu_2V_2O_7$. Разрыв смесиности α -модификации $Zn_2V_2O_7$ и $\beta-Cu_2V_2O_7$ происходит вблизи состава с содержанием 32 ± 2 мол.% $Cu_2V_2O_7$. Образец твердого раствора, содержащий 2,5 мол.% $Zn_2V_2O_7$, кристаллизуется в структуре $\alpha-Cu_2V_2O_7$.

При нагревании исследуемых образцов твердых растворов на кривых ДТА в области температур $600-650^\circ C$ обнаружены термические эффекты, величины которых не превышают 10 кДж/моль (рис. 2). Эндотермические эффекты для составов с 10 и 20 мол. % $Cu_2V_2O_7$, кристаллизующихся при комнатной температуре в структуре $\alpha-Zn_2V_2O_7$, наблюдаются при 610 и $612^\circ C$ соответственно. ДТА образцов, содержащих от 40 до 90 мол.% $Cu_2V_2O_7$ из области сосуществования твердого раствора на основе $\beta-Cu_2V_2O_7$ показал наличие эндоэффектов с постепенно возрастающей от 602 до $618^\circ C$ температурой. На политерме ДТА образца $\beta-Cu_2V_2O_7$ обнаружен хорошо обратимый эндотермический эффект при $628^\circ C$ соответствующий, по-видимому, полиморфному превращению $\beta \leftrightarrow \beta'-Cu_2V_2O_7$. Таким образом, допирование пированадата меди катионами Zn^{2+} , имеющими больший радиус, приводит к понижению температуры фазового $\beta \rightarrow \beta'$ перехода, соответственно замещение Zn^{2+} катионами Cu^{2+} в $\alpha-Zn_2V_2O_7$ ведёт к некоторому повышению температуры фазового $\alpha \rightarrow \beta-Zn_2V_2O_7$ перехода.

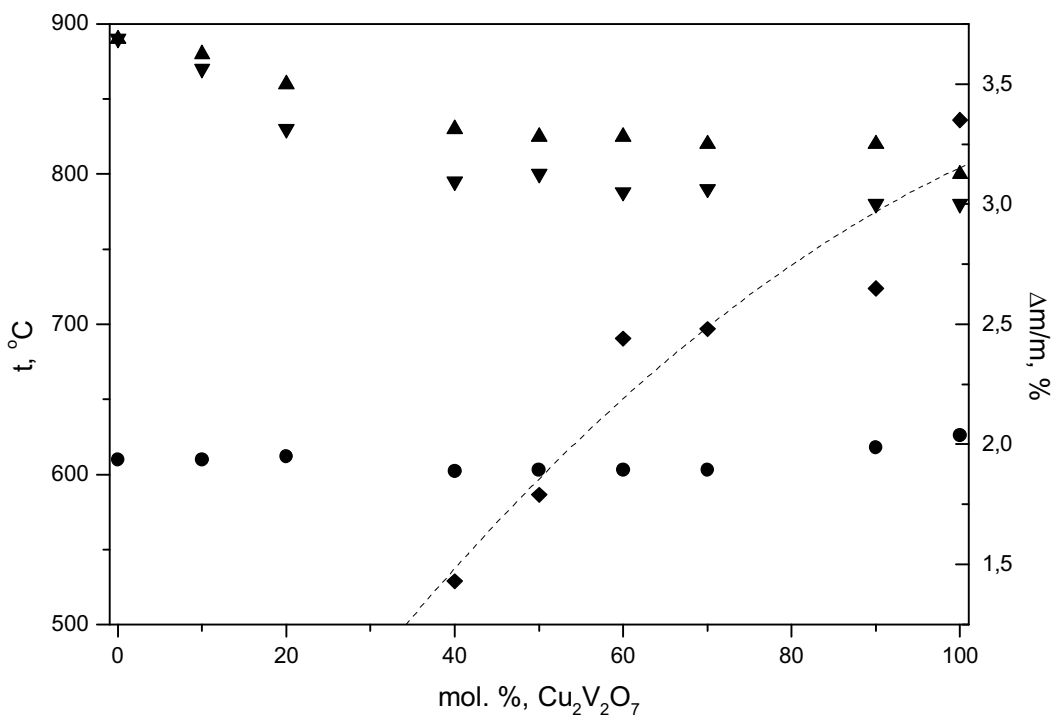


Рис. 2. Результаты термоаналитических исследований твёрдых растворов $\text{Cu}_{2-2x}\text{Zn}_{2x}\text{V}_2\text{O}_7$:
 ●, ▼ ▲ температуры термических эффектов на кривых ДТА,
 ◆ величина убыли массы при плавлении

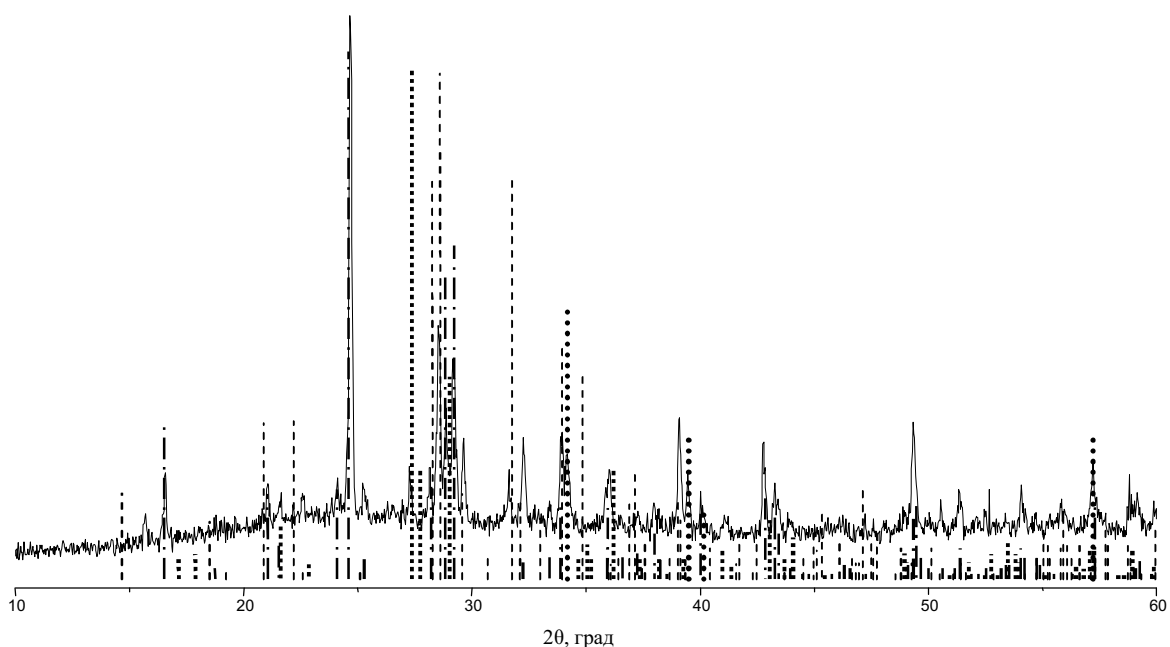


Рис. 3. Дифрактограмма образца пированадата меди, закалённого от 790 °С
 β- $\text{Cu}_2\text{V}_2\text{O}_7$, $\text{Cu}_3(\text{VO}_4)_2$, α- $\text{Cu}_2\text{V}_2\text{O}_7$, Cu_3VO_4

В предплавильной области на кривой ДТА пированадата меди фиксируется два значительных по величине (20–50 кДж/моль) эндотермических эффекта при 780 ± 5 и (800 ± 5) °С. Рентгено-

фазовый анализ при комнатной температуре образца расплава $Cu_2V_2O_7$ закалённого от $790^\circ C$ (рис. 3) позволил идентифицировать следующие фазы: $\beta-Cu_2V_2O_7$, $Cu_3(VO_4)_2$, $\alpha-Cu_2V_2O_7$, Cu_3VO_4 . Следовательно, первый эффект (780 ± 5) $^\circ C$ на политерме ДТА $Cu_2V_2O_7$ соответствует началу инконгруэнтного плавления, а второй (800 ± 5) $^\circ C$ полному исчезновению твёрдой фазы.

Плавление образцов как чистого $Cu_2V_2O_7$, так и твёрдых растворов на его основе сопровождается необратимой убылью массы, величина которой постепенно уменьшается от 3,35% до нуля с ростом концентрации пированадата цинка (см. рис. 2), что может быть обусловлено выходом в газовую фазу компонентов соединения. Потеря массы и наличие двойных эндотермических эффектов на кривых ДТА всех исследованных в настоящей работе твёрдых растворов на основе пированадата меди позволяет предположить, что они также плавятся с разложением. При плавлении $Zn_2V_2O_7$ и составов из области твердых растворов на его основе уменьшение массы не наблюдается.

Таким образом, в данной работе определены температурные и концентрационные пределы существования твердых растворов на основе пированадатов меди и цинка, определен характер плавления как исходных пированадатов, так и твердых растворов на их основе.

Работа выполнена при поддержке фонда РФФИ, проект № 07-03-01-063а.

Литература

1. Fleury, P. // C.r. Acad. sci. C. – 1966. – V. 263C. – № 11. – P. 1375.
2. Ivanova, Y. Y., Dimitriev Y. B. *et al* // C.r. Acad. sci. (Bulg.). – 1974. – V. 27, № 4. – P. 491.
3. Петрова, С.А. / С.А. Петрова, Р.Г. Захаров и др. // ДАН. 2005. – Т. 400, № 6. – С. 770.
4. Calvo, C. / C. Calvo, R. Faggiani // Acta Cryst. – 1975. – В 24. – P. 603.
5. Mercurio-Lavaud, D. / D. Mercurio-Lavaud, B. Frit // C. R. Acad. Sc. Paris. Série C. – 1973. – V. 277. – P. 1101.
6. Макаров В.А., Фотиев А.А. и др. // Журн. неорганической химии. – 1971. – Т. 16, № 10. – С. 2849.
7. Kurzawa M. *et al* // J. Thermal Analysis and Calorimetry. – 2001. – V. 64. – P. 1113.
8. Copal, R. / R. Copal, C. Calvo // Canad. J. Chem. – 1973. – V. 51. – P. 1004.
9. Красненко, Т.И. / Т.И. Красненко, В.Г. Зубков, А.П. Тютюнник и др. // Кристаллография. – 2002. – Т. 48, № 1. – С. 35.
10. Mercurio-Lavaud, D. / D. Mercurio-Lavaud, B. Frit // Acta Cryst. – 1973. – В 29. – P. 2737.
11. Eguchi, M. / M. Eguchi, M. Yamaguchi, T. Miura, T. Kishi // Denki Kagaku. – 1993. – V. 61, № 12. – P. 1347.
12. Benko, F.A. / F.A. Benko, F.P. Koffyberg // Can. J. Phys. – 1992. – V. 70. – P. 99.
13. Ponomarenko L.A., Vasil'ev A.N., Antipov E.V. *et al* // Physica B 284 – 288. – 2000. – P. 1459.
14. Waal de D., Hutter C. // Mat. Res. Bull. – 1994. – V. 29. – № 8. – P. 843.
15. J. Pommer, V. Kataev, K.-Y. Choi, P. Lemmens *et al* // Physical Review. – 2003. – В 67. – 214410.
16. Nord, A.G. / A.G. Nord, T. Stefanidis // Mater. Res. Bull. – 1985. – V. 20, № 7. – P. 845.
17. Снегирев А.И., Фотиев А.А., Журавлев В.Д. и др. // Огнеупоры. – 1987. – № 6. – С. 49.
18. Schindler, M. / M. Schindler, F.C. Hawthorne // J. Solid State Chem. – 1999. – V. 146. – P. 271.
19. Фотиев А.А. Ванадаты. Состав, синтез, структура, свойства / А.А. Фотиев и др. – М.: Наука. – 1988. – 272 с.

Поступила в редакцию 19 сентября 2007 г.

ФАЗОВЫЕ РАВНОВЕСИЯ В СИСТЕМЕ Fe – Fe₃O₄ – Fe₂GeO₄ – Ge*

С.В. Штин, А.А. Лыкасов

Описаны условия равновесия твердого раствора германия в вюстите с металлическими фазами системы Fe–Ge и шпинельными растворами. Построена фазовая диаграмма системы Fe–Ge–O при температуре 1273 К.

Сведения о фазовой диаграмме системы Fe–Ge–O ограничены. Бинарные системы Fe–Ge, Fe–O и Ge–O подробно описаны в работах [1–3]. В работе [4] изучена растворимость диоксида германия в вюстите, определена зависимость равновесного давления кислорода от состава германийзамещенного вюстита, построены изобары в вюститной области. Работа [5] посвящена исследованию фазовых равновесий в системе Fe–Ge–O в малоизученных областях равновесия твердых растворов германия в железе (α , ε и β) с вюститным раствором. В этой работе с помощью рентгеноспектрального микроанализа доказано существование твердых растворов и определены границы фазовых областей на диаграмме состояния системы Fe–Ge–O в исследуемой области. Установлено, что на фазовой диаграмме в исследуемом интервале составов существует три трехфазные и три двухфазные области с участием металлических фаз.

Исследования равновесий в системе Fe–Ge–O в настоящей работе выполнены методом измерения ЭДС гальванических элементов с твердым кислородпроводящим электролитом при 1100–1300 К с использованием методов химического, рентгенофазового и микрорентгеноспектрального методов анализа. Сущность метода ЭДС, схема гальванической ячейки и конструкция полуэлемента подробно описаны в работе [6].

Анализ данных по растворимости диоксида германия в вюстите [4] и результатов исследований условий равновесия вюститного раствора с сопряженными ему металлическими фазами [5] позволили определить растворимость германия в вюстите различной степени окисленности. По

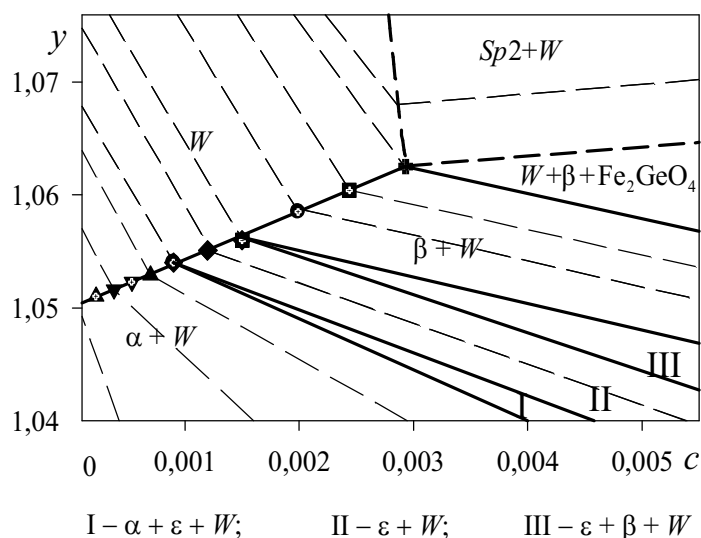


Рис. 1. Низкоокислородная граница вюститной области при температуре 1273 К

пересечению изобар кислорода вюститной области с соответствующими им конодами областей равновесия вюститной и металлических фаз определены координаты низкоокислородной границы вюститной области. Граница при температуре 1273 К показана на рис. 1.

При исследовании фазовых равновесий в области существования шпинельного и вюститного растворов были построены зависимости ЭДС гальванического элемента от состава образцов. Из характера полученных зависимостей установлено, что в этой системе имеют место трехфазные равновесия с участием вюститной и шпинельной фаз. Для образцов, которые по результатам электрохимических исследований являются трехфазными, проведен электронно-зондовый микроанализ и

обнаружено, что в этих образцах на их поверхности имеются три фазы. По соотношению компонентов в этих фазах были рассчитаны приблизительные значения их составов.

* Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ-Урал и губернатора Челябинской области, грант Г 2007 365

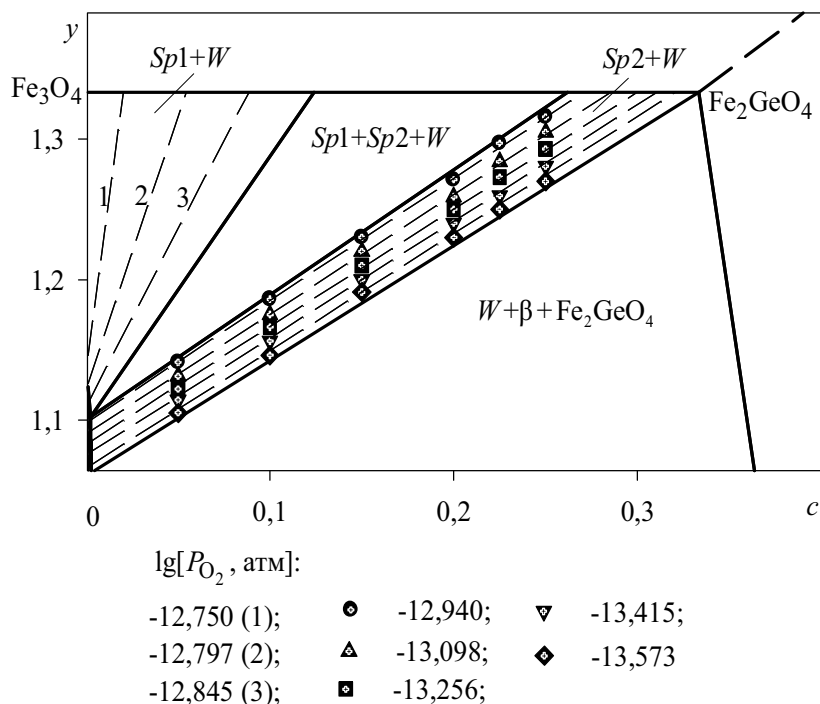


Рис. 2. Фрагмент фазовой диаграммы в области равновесия шпинельных растворов при температуре 1273 К

Одна из фаз оказалась вюститной фазой (W). Вторая фаза имеет состав, близкий к составу шпинели Fe_2GeO_4 , а третья фаза имеет степень окисленности, как у шпинели Fe_2GeO_4 , но содержит гораздо меньшее количество германия (~ в 10 раз). Очевидно, это вторая шпинельная фаза. Таким образом установлено, что Fe_3O_4 и Fe_2GeO_4 ограниченно растворяются друг в друге, образуя две шпинельные фазы: одна на основе Fe_3O_4 ($Sp1$), другая – на основе Fe_2GeO_4 ($Sp2$).

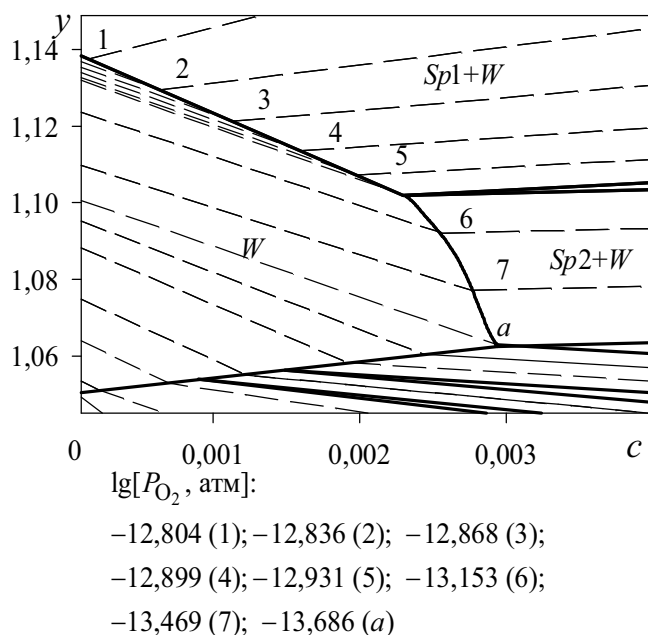


Рис. 3. Область гомогенности германийзамещенного вюstita при температуре 1273 К

По результатам исследования шпинельных растворов определены границы фазовых областей двух- и трехфазных равновесий и построен фрагмент фазовой диаграммы в этих областях (рис. 2). Пунктирными линиями в двухфазных областях проведены коноды. Соответствующие им давления кислорода даны в подписях к рисункам.

На фазовой диаграмме системы Fe–Ge–O вюститная область с высококислородной стороны граничит с областями двухфазного равновесия $Sp1+W$ и $Sp2+W$. Если изобары кислорода вюститной области провести до пересечения с конодами

указанных двухфазных областей, можно определить координаты высококислородной границы

области гомогенности германийзамещенного вюститита. На рис. 3 приведен фрагмент фазовой диаграммы в области существования вюститного раствора при температурах 1273 К.

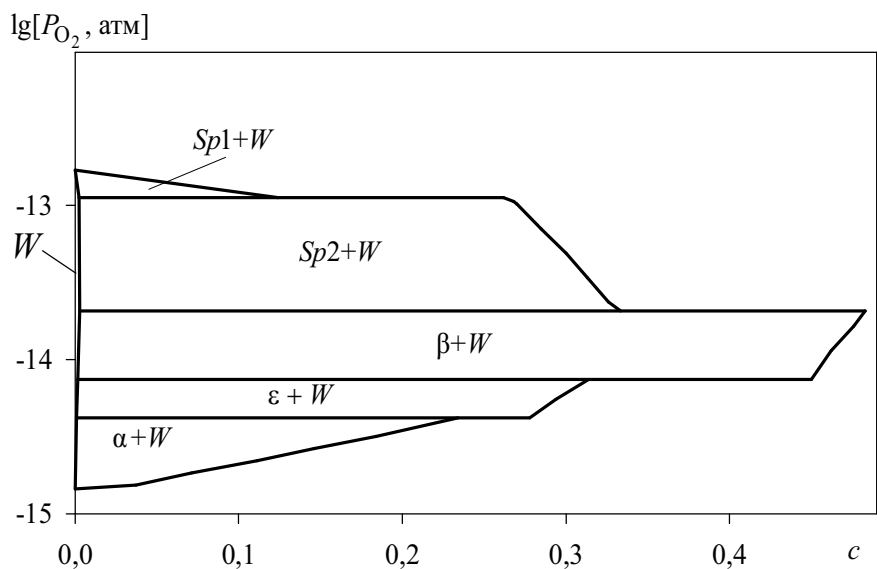
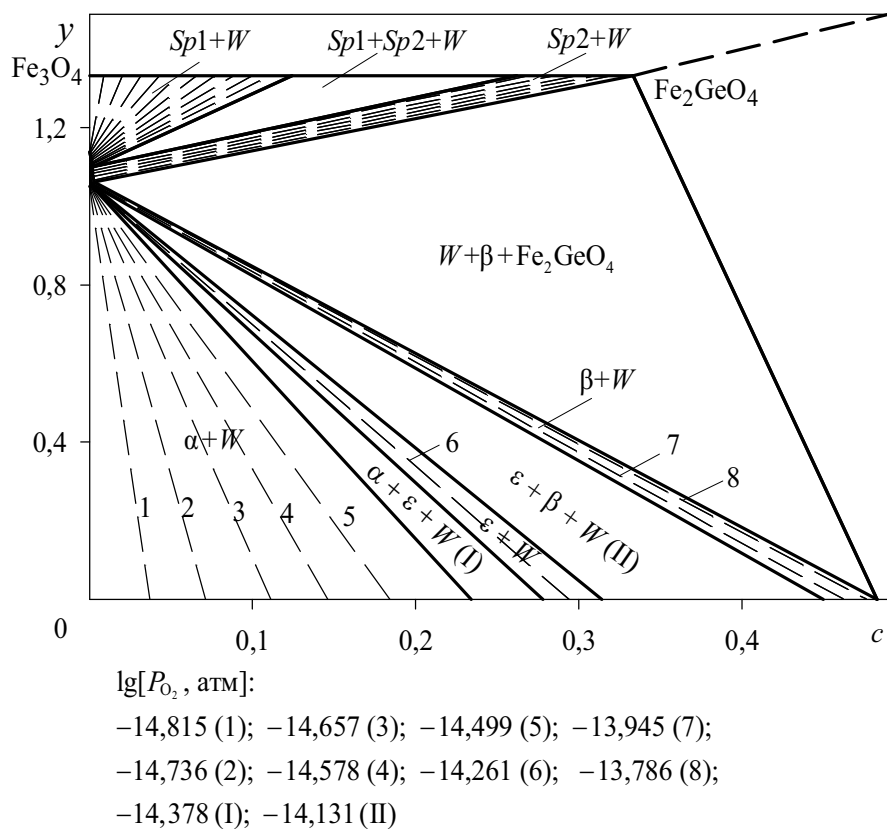


Рис. 4. Изотермическое сечение диаграммы состояния системы Fe-Ge-O при температуре 1273 К

Пересечение высоко- и низкокислородной границ вюститной области дает значение предельной растворимости германия в вюстите (точка *a* на диаграмме). При температуре 1273 К предельная растворимость германия отвечает катионной доле германия в вюститном растворе $c = 0,0029$, степень окисленности такого раствора $y = 1,064$. Таким образом, при повышении степени окисленности вюститита до $y = 1,064$ растворимость в нем германия увеличивается, а затем уменьшается. С уменьшением температуры растворимость германия в вюстите понижается – при

1173 К $c = 0,0024$, причем степень окисленности такого раствора становится более высокой ($y = 1,068$).

Диаграмма состояния Fe–Ge–O при 1273 К, построенная по литературным данным [1–3] и по результатам наших исследований, изображена на рис. 4.

Литература

1. Кубашевски, О. Диаграммы состояния двойных систем на основе железа. Пер. с англ. / О. Кубашевски, под ред. Л.А. Петровой. – М.: Металлургия. – 1985. – 184 с.
2. Диаграммы состояния двойных и многокомпонентных систем на основе железа / О.А. Банных, П.Б. Будберг, С.П. Алисова и др. – М.: Металлургия. – 1986. – 440 с.
3. Тананаев, И.В. Химия германия / И.В. Тананаев, М.Я. Шпирт. – М.: Химия. – 1967. – 451 с.
4. Лыкасов, А.А. Твердый раствор GeO_2 в вюстите / А.А. Лыкасов, С.В. Штин // Известия Челябинского научного центра. – 2004. – Вып. 2(23). – С. 88–90.
5. Штин, С.В. Равновесие вюститного и металлических растворов в системе Fe–Ge–O / С.В. Штин, Е.А. Пилипенко, А.А. Лыкасов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Металлургия». – 2005. – Вып. 5. – № 3(43). – С. 51–54.
6. Физико-химические свойства вюстита и его растворов / А.А. Лыкасов, К. Карел, А.Н. Мень и др. – Свердловск: УНЦ АН СССР. – 1987. – 230 с.

Поступила в редакцию 17 сентября 2007 г.

ПРАВИЛА ДЛЯ АВТОРОВ

1. В редакцию предоставляется электронная (документ MS Word) и печатная версия работы, экспертное заключение и контактная информация ответственного за подготовку рукописи.

2. Структура статьи: УДК, название (не более 12–15 слов), список авторов, аннотация (не более 100 слов), текст работы, литература (в порядке цитирования, ГОСТ 7.1–2003).

3. Параметры набора. Поля: зеркальные, верхнее – 23, нижнее – 23, внутри – 22, снаружи – 25 мм. Шрифт – Times New Roman масштаб 100 %, интервал – обычный, без смещения и анимации, 11 pt. Отступ красной строки 0,7 см, интервал между абзацами 0 pt, межстрочный интервал – одинарный.

4. Формулы. Стиль математический (цифры, функции и текст – прямой шрифт, переменные – курсив), основной шрифт – Times New Roman 11 pt, показатели степени 71 % и 58 %. Выключенные формулы должны быть выровнены по центру.

5. Рисунки все черно-белые. Если рисунок создан не средствами MS Office, то обязательно предоставление рисунков и в виде отдельных файлов (bmp или tiff, черно-белые с разрешением от 300 dpi).

6. Адрес редакции Вестника ЮУрГУ, серия «Математика, физика, химия»

Россия 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76, Южно-Уральский государственный университет, Физический факультет, кафедра ОиТФ, ответственному редактору проф. Бескачко Валерию Петровичу.

7. Адрес электронной почты: vestnik@physics.susu.ac.ru

8. Полную версию правил подготовки рукописей и пример оформления можно загрузить с сайта ЮУрГУ (<http://www.susu.ac.ru>) следуя ссылкам: «научные исследования», «издательская деятельность», «Вестник ЮУрГУ».

9. Подписной индекс Вестника ЮУрГУ, Серия «Математика, физика, химия»: 29024, каталог «Пресса России». Периодичность выхода – 2 номера в год.

ВЕСТНИК ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

№ 19 (91) 2007

Серия
«МАТЕМАТИКА, ФИЗИКА, ХИМИЯ»
Выпуск 9

Издательство Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 28.09.2007. Формат 60×84 1/8. Печать трафаретная.
Усл. печ. л. 14,41. Уч.-изд. л. 12,68. Тираж 500 экз. Заказ 344/66.

Отпечатано в типографии Издательства ЮУрГУ. 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.