

Учредитель – ГОУ ВПО «Южно-Уральский государственный университет»

Редакционная коллегия серии:

д.ф.-м.н., профессор **Бескачко В.П.**

(отв. редактор),

к.ф.-м.н., доцент **Голубев Е.В.**

(отв. секретарь),

д.т.н., профессор **Гуревич С.Ю.,**

к.ф.-м.н., профессор **Заляпин В.И.,**

д.ф.-м.н., профессор **Менихес Л.Д.,**

д.т.н., профессор **Садаков О.С.,**

д.т.н., профессор **Сапожников С.Б.,**

д.т.н., профессор **Чернявский А.О.**

Серия основана в 2009 году.

Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-26455 выдано 13 декабря 2006 г. Федеральной службой по надзору законодательства в сфере массовых коммуникаций и охране культурного наследия.

Журнал включен в Реферативный журнал и Базы данных ВИНТИ. Сведения о журнале ежегодно публикуются в международной справочной системе по периодическим и продолжающимся изданиям «Ulrich's Periodicals Directory».

Подписной индекс 29211 в объединенном каталоге «Пресса России».

Периодичность выхода – 2 номера в год.

СОДЕРЖАНИЕ

Математика

КАРАЧИК В.В. Разложения Альманси для невырожденных операторов второго порядка.....	4
КУДРЯВЦЕВ К.Н. Об отсутствии максиминных стратегий в одной дифференциальной 13 игре	13
ТАБАРИНЦЕВА Е.В. О решении одной граничной обратной задачи для параболического 21 уравнения.....	21
ХОХЛОВ А.Д. Условия выживания популяции в моделях Николсона с запаздыванием	29
ХОХЛОВА Т.Н. Конус устойчивости для линейного матричного дифференциального уравнения с запаздыванием.....	33

Механика

БИТЮРИН А.А. Потеря устойчивости однородного стержня при продольном ударе о стержень, взаимодействующий с жесткой преградой.....	38
САДАКОВ О.С., ЩЕРБАКОВА А.О. Учет геометрической нелинейности в расчетах неупругого деформирования конструкций. Декомпозиция деформации.....	45

Физика

БРЫЗГАЛОВ А.Н., КОЛОТИЛОВ А.В., АКимова В.М. Сенсбилизация в кристаллах рубина, активированных высокой концентрацией ионов титана	51
ВОРОНЦОВ А.Г. Об особенностях моделирования процессов конденсации методом молекулярной динамики	56
ЗАКИРЬЯНОВ Ф.К., ХАМЗИН С.Р. Топологические солитоны в однородной асимметричной модели молекулы ДНК.....	60
КАРИМОВ Б.Х. Фотовольтаические и фоторефрактивные эффекты в кристаллах со структурой селенита.....	68
НЕВСКИЙ С.А., КОНОВАЛОВ С.В., ГРОМОВ В.Е. Изменение параметров релаксации напряжений алюминия А 85 под влиянием электрического потенциала при различных температурах	74
ПРОКУДИНА Л.А., САЛАМАТОВ Е.А. Моделирование оптимальных режимов течения жидкой пленки в контакте с газовым потоком.....	79
РЕЧКАЛОВ В.Г., УШАКОВ В.Л., ПЫЗИН Г.П., БЕСКАЧКО В.П. Компьютерная обработка изображения в методе определения коэффициента поверхностного натяжения жидкости по форме поверхности капли	83
САДЫКОВ Н.Р., СКОРКИН Н.А. Квантово-механический подход к описанию возможности усиления излучения с помощью континуума нанотрубок.....	89
УШАКОВ В.Л., ПЫЗИН Г.П., РЕЧКАЛОВ В.Г., БЕСКАЧКО В.П. Оценка параметров интерферограмм, необходимых для определения радиуса кривизны в вершине лежащей капли.....	95
ФОКИН А.В., БРЫЗГАЛОВ А.Н., ВОЛКОВ П.В. Формирование кристаллов систем $\text{NH}_4\text{Cl}+\text{H}_2\text{O}$ и $\text{NH}_4\text{Cl}+\text{CuSO}_4+\text{H}_2\text{O}$	101
ЧЕРНОВ В.М., БУТАКОВ А.В. Ядерная магнитная релаксация и неаффинная деформация в сшитых эластомерах	105
ШУЛЬГИНОВ А.А. Кластерный анализ флуктуаций проводимости тонких платиновых плёнок	112

CONTENTS

Mathematics

KARACHIK V.V. Almansi decompositions for non-singular second order partial differential operators	4
KUDRYAVTSEV K.N. About absence maximin strategy in to one differential game	13
TABARINTSEVA E.V. About solving one boundary inverse problem for parabolic equation	21
KHOKHLOV A.D. Conditions of the survival of population in Nicholson's models with delay	29
KHOHLOVA T.N. Stability cone for the retarded linear matrix differential equation	33

Mechanics

BITYURIN A.A. Stability loss of the homogeneous core at longitudinal impact on the core, interacting with the hard barrier	38
SADAKOV O.S., SCHERBAKOVA A.O. Considering the geometrical nonlinearity in calculation of inelastic deformation of structures. Decomposition of strains	45

Physics

BRYZGALOV A.N., KOLOTILOV A.V., AKIMOVA V.M. Sensitization in the ruby crystals 51 activated by high concentration of ions of the titan	
VORONTSOV A.G. On peculiarities of modeling of condensation by molecular dynamics methods	56
ZAKIRYANOV F.K., KHAMZIN S.R. Topological solitons in the homogeneous asymmetric model of a DNA molecule	60
KARIMOV B.K. The photovoltaic and photorefractive effects in crystals with the selenite structure	68
NEVSKY S.A., KONOVALOV S.V., GROMOV V.E. Change of parameters of stress relaxation of aluminum A 85 under influence of electrical potential at various temperatures	74
PROKUDINA L.A., SALAMATOV E.A. Modeling of optimal modes of liquid film flow in contact with gas stream	79
RECHKALOV V.G., PYZIN G.P., USHACOV V.L., BESKACHKO V.P. Computer-driven processing of the liquid drop shape image for determination of surface tension coefficient.	83
SADYKOV N.R., SCORKIN N.A. Quantum-mechanical approach to description of the possibility of the reinforcement of the radiation by means of continuum nanotubes	89
USHACOV V.L., PYZIN G.P., RECHKALOV V.G., BESKACHKO V.P. The interferogram parameters evaluation required for the curvature radius determination at the top of the sessile drop	95
FOKIN A.V., BRYZGALOV A.N., VOLKOV P.V. The formation of crystal of systems $\text{NH}_4\text{Cl}+\text{H}_2\text{O}$ AND $\text{NH}_4\text{Cl}+\text{CuSO}_4+\text{H}_2\text{O}$	101
CHERNOV V.M., BUTAKOV A.V. Nuclear magnetic relaxation and nonaffine deformation in cross-linked elastomers	105
SHULGINOV A.A. Cluster analysis of fluctuation conductivity of the thin platinum films	112

РАЗЛОЖЕНИЯ АЛЬМАНСИ ДЛЯ НЕВЫРОЖДЕННЫХ ОПЕРАТОРОВ ВТОРОГО ПОРЯДКА

В.В. Карачик

Рассматривается обобщение известной формулы Альманси на невырожденные дифференциальные операторы второго порядка с постоянными коэффициентами. Приводится простая формула нахождения первого гармонического составляющего в классической формуле Альманси.

Ключевые слова: формула Альманси, дифференциальные операторы второго порядка, полиномиальные решения.

1. Введение

В настоящей работе рассматривается обобщение известной формулы Альманси на невырожденные дифференциальные операторы второго порядка с постоянными коэффициентами. Сначала в разделе 2 обсуждается проблема делимости многочленов и в теореме 1 приводится формула нахождения первого гармонического составляющего в классической формуле Альманси. Раздел 3 носит вспомогательный характер, а в разделе 4 получены основные результаты. В работе [1] рассматривалось разложение Альманси для решений уравнения $\Delta u = 0$, где $\Delta = \Delta_x + \lambda \partial^2 / \partial t^2$ или $\Delta = \Delta_x + \lambda \partial / \partial t$ при $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$. В работе автора [2] были получены разложения типа Альманси для дифференциальных операторов вида $\Delta_\lambda = \lambda_1 \partial^2 / \partial x_1^2 + \dots + \lambda_n \partial^2 / \partial x_n^2$, $\lambda_k \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, в ограниченной, звездной области $\Omega \subset \mathbb{R}^n$. В работе [3] разложения Альманси применялись для построения решений неоднородного полигармонического уравнения и уравнения Гельмгольца.

В разделе 4 обосновывается возможность разложений типа Альманси

$$f(x) = \sum_{k=1}^{\infty} |x|_A^{2k} u_k(x), \quad x \in \Omega \subset \mathbb{R}^n \quad (1)$$

для операторов $L(D)$ второго порядка $L(D) = (A\nabla, \nabla)$, где матрица A порядка $n \times n$ невырожденная и симметричная, $|x|_A^2 = (A^{-1}x, x)$, причем следует считать, что $|x|_A^{2k} \equiv (|x|_A^2)^k$, а $u_k(x)$ – некоторые решения уравнения $L(D)u(x) = 0$ в звездной области Ω , определяемые единственным образом по заданной функции $f(x)$. Основным результатом содержится в теореме 4.

2. Нахождение первой гармонической функции в представлении Альманси

Из результатов, полученных в [4] (Proposition 3), можно получить одно свойство решений линейного уравнения в частных производных с постоянными коэффициентами вида

$$L(D)u \equiv \sum_{k \leq |\alpha| \leq q} a_\alpha D^\alpha u(x) = 0.$$

Пусть $L(D)$ – дифференциальный оператор из уравнения выше и $P(x)$ – произвольный полином, тогда существует единственный полином $H(x)$ из $\ker L(D) \cap P$ и единственный полином $Q(x)$ такие, что выполнено равенство

$$P(x) = Q(x)L(x) + H(x). \quad (2)$$

Данное равенство может быть рассмотрено как определение «делимости» полинома $P(x)$ на полином $L(x)$. Остаток от «деления» – полином $H(x)$ не будет в общем случае иметь степень меньшую чем $L(x)$, но будет таким, что $L(D)H(x) = 0$. Нахождение «остатка», т.е. полинома $H(x)$, по полиному $P(x)$ – задача не простая, однако, в некоторых случаях, как, например, при $L(D) = \Delta$ [5] или $L(D)$ из (5), разрешимая. Приведем один из способов нахождения гармониче-

ского полинома $H(x)$ в разложении (2) в случае $L(D) = \Delta$ и при $P(x) = P_m(x)$, где $P_m(x)$ – произвольный однородный полином m -й степени.

Лемма 1. Пусть $H_m(x)$ – однородный гармонический полином, тогда при $p \notin 2 \cdot \{0, \dots, m-1\}$ верна формула

$$\|x\|^p H_m(x/\|x\|^2) = \frac{1}{(p, -2)_m} H_m(D) \|x\|^p, \tag{3}$$

где обобщенный символ Похгаммера $(p, -2)_m$ имеет вид $(p, -2)_m = p(p-2)(p-2m+2)$.

Доказательство. Пусть $m=1$ и $H_1(x) = a_1 x_1 + \dots + a_n x_n$. Тогда очевидно, что для $k=1, \dots, n$

$$\frac{\partial}{\partial x_k} \frac{\|x\|^p}{p} = \|x\|^p \frac{x_k}{\|x\|^2} \Rightarrow \frac{1}{p} \sum_{k=1}^n a_k \frac{\partial}{\partial x_k} \|x\|^p = \|x\|^p \sum_{k=1}^n a_k \frac{x_k}{\|x\|^2} \frac{1}{p} H_1(D) \|x\|^p = \|x\|^p H_1(x/\|x\|^2).$$

Поскольку $(p, -2)_1 = p$, то в этом случае формула (3) справедлива.

Пусть при $m < k$ лемма верна, докажем ее справедливость и при $m = k$. Воспользуемся формулой Эйлера для однородных функций. Будем иметь

$$H_k(x) = \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{k} H_k^{(i)}(x), \tag{4}$$

где обозначено $H_k^{(i)}(x) = (H_k(x))'_{x_i}$. Очевидно, что $H_k^{(i)}(x)$ – однородный гармонический полином $(k-1)$ -й степени. Используя формулу (4) и при этом, имея в виду предположение индукции, можно найти

$$H_k(D) \|x\|^p = \sum_{i=1}^n \frac{1}{k} \frac{\partial}{\partial x_i} H_k^{(i)}(D) \|x\|^p = \sum_{i=1}^n \frac{1}{k} (p, -2)_{k-1} \frac{\partial}{\partial x_i} (\|x\|^{p-2k+2} H_k^{(i)}(x)).$$

Теперь учитывая, что $\sum_{i=1}^n (H_k^{(i)}(x))'_{x_i} = \Delta H_k(x) = 0$, получаем

$$H_k(D) \|x\|^p = (p, -2)_{k-1} (p-2k+2) \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{k} H_k^{(i)}(x) \|x\|^{p-2k} = (p, -2)_k \|x\|^{p-2k} \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{k} H_k^{(i)}(x),$$

где было использовано равенство $(p, -2)_{k-1} (p-2k+2) = (p, -2)_k$. Применяя опять формулу (4) и деля полученное равенство на $(p, -2)_k$, получим (3). Лемма доказана.

Теорема 1. Пусть $P_m(x) = Q_{m-2}(x) \|x\|^2 + H_m(x)$ и $n > 2$, тогда гармонический полином $H_m(x)$ находится из равенства

$$H_m(x) = (-1)^m \frac{\|x\|^{2m+n-2}}{(n-2, 2)_m} P_m(D) \|x\|^{2-n}.$$

Доказательство. Нетрудно видеть, что $P_m(D) \|x\|^{2-n} = H_m(D) \|x\|^{2-n}$ при $x \neq 0$ и $n > 2$, а поэтому, применяя лемму 1 при $p = 2 - n$, будем иметь

$$H_m(x) = \frac{\|x\|^{2m+n-2}}{(2-n, -2)_m} H_m(D) \|x\|^{2-n} = (-1)^m \frac{\|x\|^{2m+n-2}}{(n-2, 2)_m} P_m(D) \|x\|^{2-n}.$$

Теорема доказана.

Пример 1. Пусть $m=2$ и $P_2(x) = x_i^2$. Тогда по теореме 1

$$H_2(x) = (-1)^2 \frac{\|x\|^{n+2}}{(n-2, 2)_2} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} \|x\|^{2-n} = \frac{\|x\|^{n+2}}{(n-2)n} (2-n)(\|x\|^{-n} - n x_i^2 \|x\|^{-n-2}) = x_i^2 - \frac{1}{n} \|x\|^2$$

и значит верно разложение $x_i^2 = \|x\|^2/n + (x_i^2 - \|x\|^2/n)$.

3. Нормированная система функций относительно оператора второго порядка

Пусть $u \in C^2(\Omega)$ – классическое решение дифференциального уравнения второго порядка с постоянными коэффициентами:

$$L(D)u(x) \equiv \sum_{i,j=1}^n a_{i,j} \frac{\partial^2 u}{\partial x_i \partial x_j} = 0, \quad x \in \Omega \subset R^n, \tag{5}$$

где $a_{i,j} = const$ и матрица $A = (a_{i,j})_{i,j=1}^n$ – невырожденная $\det A \neq 0$ и симметричная $a_{i,j} = a_{j,i}$, $n > 1$. Предположим также, что область Ω обладает свойством звездности: $\forall t \in [0,1], x \in \Omega \Rightarrow tx \in \Omega$. Введем однородный многочлен второго порядка $|x|_A^2 \equiv (A^{-1}x, x)$, где матрица A^{-1} – обратная к матрице $A = (a_{i,j})_{i,j=1}^n$, причем будем считать, что $|x|_A^{2k} \equiv (|x|_A^2)^k$. Ясно, что многочлен $|x|_A^2$ может принимать как положительные, так и отрицательные значения, если матрица A имеет неопределенный знак. Этот многочлен имеет странное обозначение $|x|_A^2$ для того, чтобы сохранить единообразным внешний вид (1) разложения типа Альманси для различных операторов $L(D)$. Построим 0-нормированную систему функций $\{f_k(x)\}$ в Ω , т.е. систему, обладающую свойством [6]

$$Lf_0(x) = 0; \quad Lf_k(x) = f_{k-1}(x), \quad k \in N. \tag{5a}$$

Для этого, зададим на множестве Ω систему функций $\{G_k(x;u) : k \in N_0\}$ в виде: $G_0(x;u) = u(x)$ и для $k \in N$

$$G_k(x;u) = |x|_A^{2k} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{k-1} \alpha^{n/2-1}}{4^k k!(k-1)!} u(\alpha x) d\alpha. \tag{6}$$

Аргумент u у функций системы $\{G_k(x;u)\}$ означает, что первая функция этой системы – основание системы, равно $u(x)$.

Теорема 2. Система функций $\{G_k(x;u) : k \in \mathbb{N}_0 = \mathbb{N} \cup \{0\}\}$ обладает свойством (5a).

Доказательство. Благодаря свойству звездности области Ω , функции $G_k(x;u)$ из (6) определены на всей области Ω . Кроме того, $G_k(x;u) \in C^2(\Omega)$, поскольку $u \in C^2(\Omega)$ и поэтому по правилу Лейбница возможно двукратное дифференцирование по параметру x под знаком интеграла при $x \in \Omega$. 1^0 . Установим справедливость равенства $L(D)G_k(x;u) = G_{k-1}(x;u)$. Для этого сначала докажем тождество

$$L(D)(|x|_A^{2k} v) = vL(D)|x|_A^{2k} + |x|_A^{2k} L(D)v + 4k |x|_A^{2k-2} \sum_{i=1}^n x_i \frac{\partial v}{\partial x_i}. \tag{7}$$

Легко видеть, что если $A = A^t$, то

$$\begin{aligned} L(D)(f \cdot g) &= \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} \frac{\partial^2 (f \cdot g)}{\partial x_i \partial x_j} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} (f_{x_i x_j} g + f_{x_i} g_{x_j} + f_{x_j} g_{x_i} + f g_{x_i x_j}) = \\ &= gL(D)f + \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} g_{x_j} f_{x_i} + \sum_{j=1}^n \sum_{i=1}^n a_{ij} f_{x_j} g_{x_i} + fL(D)g = L(D)f + \\ &+ g(A\nabla g, \nabla f) + (A\nabla f, \nabla g) + fL(D)g = gL(D)f + 2(A\nabla f, \nabla g) + fL(D)g. \end{aligned} \tag{8}$$

Вычислим $\nabla(|x|_A^{2k})$. Из симметричности матрицы A следует симметричность матрицы A^{-1} и значит верны равенства

$$\nabla |x|_A^{2k} = \nabla (A^{-1}x, x)^k = k(A^{-1}x, x)^{k-1} \nabla (A^{-1}x, x) = k(A^{-1}x, x)^{k-1} (A^{-1} + (A^{-1})^t)x = 2k |x|_A^{2k-2} A^{-1}x.$$

Поэтому из (8) с помощью предыдущего равенства найдем

$$\begin{aligned} L(D)(|x|_A^{2k} v) &= vL(D)|x|_A^{2k} + 2(A\nabla |x|_A^{2k}, \nabla v) + |x|_A^{2k} L(D)v = vL(D)|x|_A^{2k} + \\ &+ 4k |x|_A^{2k-2} (AA^{-1}x, \nabla v) + |x|_A^{2k} L(D)v = vL(D)|x|_A^{2k} + 4k |x|_A^{2k-2} \sum_{i=1}^n x_i v_{x_i} + |x|_A^{2k} L(D)v. \end{aligned}$$

Формула (7) доказана. Теперь вычислим выражение $L(D)|x|_A^{2k}$. Обозначим $B = A^{-1}$. Нетрудно заметить, что

$$\frac{\partial}{\partial x_s}(Bx, x) = (b_{ss}x_s^2 + 2x_s \sum_{i=1, i \neq s}^n b_{si}x_i + \sum_{i=1, i \neq s}^n \sum_{j=1, j \neq s}^n b_{ij}x_ix_j)'_{x_s} = 2b_{ss}x_s + 2 \sum_{i=1, i \neq s}^n b_{si}x_i = 2 \sum_{i=1}^n b_{si}x_i$$

и значит

$$\begin{aligned} L(D)|x|_A^{2k} &= \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} (Bx, x)^k = k \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} (Bx, x)'_{x_j} (Bx, x)^{k-1} = \\ &= 2k \sum_{i,j=1}^n a_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} (|x|_A^{2k-2} \sum_{s=1}^n b_{js}x_s) = 2k |x|_A^{2k-2} \sum_{i,j=1}^n a_{ij} b_{ji} + \\ &+ 4k(k-1) \sum_{i,j=1}^n a_{ij} |x|_A^{2k-4} \sum_{r=1}^n b_{ir}x_r \sum_{s=1}^n b_{js}x_s = 2kl |x|_A^{2k-2} + 4k(k-1) |x|_A^{2k-4} \sum_{r,s=1}^n c_{rs}x_r x_s, \end{aligned} \quad (9)$$

где обозначено $l = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} b_{ji}$ и $c_{rs} = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} b_{ir} b_{js}$. Поскольку b_{ij} – элементы обратной матрицы к матрице A , то $b_{ji} = A_{ij}/\det A$, где A_{ij} – алгебраическое дополнение до элемента a_{ij} матрицы A . Используя формулу раскрытия определителя $\det A$ по некоторой строке матрицы A , получаем

$$l = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} b_{ji} = \frac{1}{\det A} \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} A_{ij} = \frac{1}{\det A} \sum_{i=1}^n \det A = n.$$

Далее, поскольку $B = A^{-1}$, то будем иметь

$$c_{rs} = \sum_{i,j=1}^n a_{ij} b_{ir} b_{js} = \sum_{i=1}^n b_{ir} \sum_{j=1}^n a_{ij} b_{js} = \sum_{i=1}^n b_{ir} \delta_{is} = b_{sr},$$

где δ_{ij} – символ Кронекера. Таким образом, из (9) вытекает, что

$$L(D)|x|_A^{2k} = 2kn |x|_A^{2k-2} + 4k(k-1) |x|_A^{2k-4} \sum_{r,s=1}^n b_{sr} x_r x_s = 2kn |x|_A^{2k-2} + 4k(k-1) |x|_A^{2k-4} (Bx, x).$$

Вспоминая, что $(Bx, x) = (A^{-1}x, x) = |x|_A^{-2}$, найдем

$$L(D)|x|_A^{2k} = 2k(2k+n-2) |x|_A^{2k-2}. \quad (10)$$

Вернемся к доказательству равенства $L(D)G_k(x;u) = G_{k-1}(x;u)$. Нам понадобится следующее тождество:

$$\sum_{i=1}^n x_i \frac{\partial v}{\partial x_i}(\alpha x) = \alpha \sum_{i=1}^n x_i v_{x_i}(\alpha x) = \alpha \frac{\partial v}{\partial \alpha}(\alpha x),$$

а также тот факт, что если $L(D)u(x) = 0, x \in \Omega$, то при $\alpha \in [0,1]$

$$L(D)u(\alpha x) = \alpha^2 \sum_{i,j=1}^n a_{ij} u_{x_i x_j}(\alpha x) = 0. \quad (11)$$

Поэтому с помощью формул (7) и (10) найдем

$$\begin{aligned} L(D)(|x|_A^{2k} u(\alpha x)) &= u(\alpha x) L(D)|x|_A^{2k} + \alpha^2 |x|_A^{2k} (L(D)u)(\alpha x) + 4k\alpha |x|_A^{2k-2} \sum_{i=1}^n x_i u_{x_i}(\alpha x) = \\ &= 2k |x|_A^{2k-2} ((2k+n-2)u(\alpha x) + 2\alpha \sum_{i=1}^n x_i u_{x_i}(\alpha x)). \end{aligned}$$

Отсюда, вспоминая определение (6) функции $G_k(x;u)$, запишем

$$L(D)G_k(x;u) = 2 |x|_A^{2k-2} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{k-1} \alpha^{n/2-1}}{4^k (k-1)!(k-1)!} \left((2k+n-2)u(\alpha x) + 2\alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} u(\alpha x) \right) d\alpha. \quad (12)$$

Пусть $k \geq 2$. Применяя интегрирование по частям, будем иметь

$$L(D)G_k(x;u) = 2|x|_A^{2k-2} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{k-2} \alpha^{n/2-1}}{4^k (k-1)!(k-1)!} ((2k+n-2)(1-\alpha) + 2(k-1)\alpha - n(1-\alpha))u(\alpha x) d\alpha = |x|_A^{2k-2} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{k-2} \alpha^{n/2-1}}{4^k (k-1)!(k-1)!} 2(2k-2)u(\alpha x) d\alpha = G_{k-1}(x;u).$$

Если $k=1$, тогда согласно (12) можем записать

$$L(D)G_1(x;u) = 2 \int_0^1 \frac{1}{4} \alpha^{n/2-1} \left(nu(\alpha x) + 2\alpha \frac{\partial}{\partial \alpha} u(\alpha x) \right) d\alpha = \alpha^{n/2} u(\alpha x)|_0^1 = u(x) \equiv G_0(x;u).$$

Если $k=0$, тогда $L(D)G_0(x;u) \equiv L(D)u(x) = 0$. Теорема доказана.

Замечание 1. Если оператор $L(D)$ имеет вид $L(D) = \lambda_1 \partial^2 / \partial x_1^2 + \dots + \lambda_n \partial^2 / \partial x_n^2$, то в этом случае $A^{-1} = \text{diag}(\lambda_1^{-1}, \dots, \lambda_n^{-1})$ и значит $|x|_A^2 = 1/\lambda_1 x_1^2 + \dots + 1/\lambda_n x_n^2$ [2]. Подобная система функций была построена также для оператора Лапласа $L(D) = \Delta$ в [6].

4. Разложение Альманси

Из теоремы 2 следует, что

$$L^r(D)G_k(x;u(x)) = \begin{cases} G_{k-r}(x;u(x)), & k > r \\ u(x), & k = r \\ 0, & k < r \end{cases} \quad (13)$$

а поэтому функция $G_k(x;u(x))$ при $k=0,1,\dots,m$ и функции $u(x)$, удовлетворяющей уравнению (5) удовлетворяет итерированному уравнению (5):

$$L^{m+1}(D)u(x) = 0, \quad x \in \Omega. \quad (14)$$

Теорема 3. Пусть функция $p(x)$ записывается в виде

$$p(x) = G_0(x;v_0) + G_1(x;v_1) + \dots + G_m(x;v_m) \quad (15)$$

при некоторых $v_k(x)$, удовлетворяющих уравнению (5). Тогда функции $v_k(x)$ единственны и находятся из равенства

$$v_k(x) = L^k(D)p(x) + \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^s |x|_A^{2s} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{s-1} \alpha^{s+n/2-2}}{4^s s!(s-1)!} L^{k+s}(D)p(\alpha x) d\alpha, \quad (16)$$

где $L^k(D)p(\alpha x) = L^k(D)p(y)|_{y=\alpha x}$.

Доказательство. Проведем доказательство аналогично доказательству теоремы 3 из [2]. Пусть для функции $p(x)$ имеет место формула (15). Найдем функции $v_k(x)$. Из формулы (13) следует, что

$$L^m(D)G_m(x;v_m) = v_m(x). \quad (17)$$

Далее, опять с учетом (13), можем записать

$$\begin{aligned} L^{m-1}(D)p(x) &= L^{m-1}(D)(G_0(x;v_0) + G_1(x;v_1) + \dots + G_m(x;v_m)) = \\ &= G_0(x;v_{m-1}) + G_1(x;v_m) = v_{m-1}(x) + |x|_A^2 \int_0^1 \frac{\alpha^{n/2-1}}{4} v_m(\alpha x) d\alpha. \end{aligned}$$

Отсюда, используя найденное значение $v_m(x)$, найдем

$$v_{m-1}(x) = L^{m-1}(D)p(x) - |x|_A^2 \int_0^1 \frac{\alpha^{n/2-1}}{4} L^m(D)p(\alpha x) d\alpha. \quad (18)$$

Аналогично, с учетом (13), запишем

$$\begin{aligned} L^{m-2}(D)p(x) &= G_0(x;v_{m-2}) + G_1(x;v_{m-1}) + G_2(x;v_m) = v_{m-2}(x) + \\ &+ |x|_A^2 \int_0^1 \frac{\alpha^{n/2-1}}{4} v_{m-1}(\alpha x) d\alpha + |x|_A^4 \int_0^1 \frac{(1-\alpha)\alpha^{n/2-1}}{4^2 2!} v_m(\alpha x) d\alpha. \end{aligned}$$

Откуда, используя (18) и (17), найдем

$$v_{m-2}(x) = L^{m-2}(D)p(x) - |x|_A^2 \int_0^1 \frac{\alpha^{n/2-1}}{4} L^{m-1}(D)p(\alpha x) d\alpha + |x|_A^4 \int_0^1 \frac{\alpha^{n/2+1}}{4^2} \int_0^1 \beta^{n/2-1} L^m(D)p(\alpha\beta x) d\beta d\alpha - |x|_A^4 \int_0^1 \frac{(1-\alpha)\alpha^{n/2-1}}{4^2 2!} L^m(D)p(\alpha x) d\alpha. \quad (19)$$

Делая замену переменных $\alpha\beta \rightarrow \beta$ во втором интеграле, а затем, меняя порядок интегрирования, можем записать

$$|x|_A^4 \int_0^1 \frac{\alpha^{n/2-1}}{4^2} L^m(D)p(\alpha x) \int_\alpha^1 \beta d\beta d\alpha = |x|_A^4 \int_0^1 (1+\alpha) \frac{(1-\alpha)\alpha^{n/2-1}}{4^2 2!} L^m(D)p(\alpha x) d\alpha.$$

С учетом этого равенства из (19) можем получить

$$v_{m-2}(x) = L^{m-2}(D)p(x) - |x|_A^2 \int_0^1 \frac{\alpha^{n/2-1}}{4} L^{m-1}(D)p(\alpha x) d\alpha + |x|_A^4 \int_0^1 \frac{(1-\alpha)\alpha^{n/2}}{4^2 2!} L^m(D)p(\alpha x) d\alpha. \quad (20)$$

Теперь мы в состоянии предложить общую формулу для вычисления функции $v_{m-i}(x)$. Она имеет вид

$$v_{m-i}(x) = L^{m-i}(D)p(x) + \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^s |x|_A^{2s} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{s-1} \alpha^{s+n/2-2}}{4^s s!(s-1)!} L^{m-i+s}(D)p(\alpha x) d\alpha, \quad (21)$$

где $i=1, \dots, m$. Пределы суммирования по s указаны бесконечные, но по существу при $s > m$ имеем $L^{m-i+s}(D)p(x) = 0$. Докажем верность (21). Очевидно, что согласно (18) и (20) эта формула верна для $i=1, 2$. Предполагая верность (21) при некотором $j \geq 1$ и для всех $i \leq j$, докажем ее справедливость и при $i = j + 1$. Из (15), с учетом (13), нетрудно получить

$$L^{m-j-1}(D)p(x) = v_{m-j-1} + G_1(x; v_{m-j}) + \dots + G_{j+1}(x; v_m),$$

откуда найдем

$$v_{m-j-1}(x) = L^{m-j-1}(D)p(x) - \sum_{i=1}^{j+1} |x|_A^{2i} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{i-1} \alpha^{n/2-1}}{4^i i!(i-1)!} v_{m-j-1+i}(\alpha x) d\alpha.$$

Используя предположение индукции (21) и равенство $L^k(D)p = 0$ при $k \geq m + 1$, записываем

$$v_{m-j-1}(x) = L^{m-j-1}(D)p(x) - \sum_{i=1}^{\infty} |x|_A^{2i} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{i-1} \alpha^{n/2-1}}{4^i i!(i-1)!} L^{m-j-1+i}(D)p(\alpha x) d\alpha - \sum_{i=1}^{\infty} |x|_A^{2i} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{i-1} \alpha^{n/2-1}}{4^i i!(i-1)!} \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^s |x|_A^{2s} \int_0^1 \frac{(1-\beta)^{s-1} \beta^{s+n/2-2}}{4^s s!(s-1)!} L^{m-j-1+i+s}(D)p(\alpha\beta x) d\beta d\alpha. \quad (22)$$

Обозначим последнее слагаемое в полученной сумме через $J(p)$

$$J(p) = - \sum_{i,s=1}^{\infty} (-1)^s |x|_A^{2(i+s)} \int_0^1 \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{i-1} \alpha^{2s+n/2-1}}{4^i i!(i-1)!} \frac{(1-\beta)^{s-1} \beta^{s+n/2-2}}{4^s s!(s-1)!} L^{m-j-1+i+s}(D)p(\alpha\beta x) d\beta d\alpha. \quad (23)$$

После замены $\alpha\beta \rightarrow \beta$ во внутреннем интеграле, получим

$$J(p) = - \sum_{i,s=1}^{\infty} (-1)^s |x|_A^{2(i+s)} \int_0^1 \int_0^\alpha \frac{\alpha(1-\alpha)^{i-1} (\alpha-\beta)^{s-1}}{4^{i+s} i!s!(i-1)!(s-1)!} \beta^{n/2+s-2} L^{m-j-1+i+s}(D)p(\beta x) d\beta d\alpha.$$

Аналогично работе [2] вычислим

$$J(p) = \sum_{l=2}^{\infty} (-1)^l |x|_A^{2l} \int_0^1 \frac{(1-\beta)^{l-1} \beta^{l+n/2-2}}{4^l l!(l-1)!} L^{m-j-1+l}(D)p(\beta x) d\beta + \sum_{l=2}^{\infty} |x|_A^{2l} \int_0^1 \frac{(1-\beta)^{l-1} \beta^{n/2-1}}{4^l l!(l-1)!} L^{m-j-1+l}(D)p(\beta x) d\beta = \sum_{i=1}^{\infty} (-1)^i |x|_A^{2i} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{i-1} \alpha^{i+n/2-2}}{4^i i!(i-1)!} \times \times L^{m-j-1+i}(D)p(\alpha x) d\alpha + \sum_{i=1}^{\infty} |x|_A^{2i} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{i-1} \alpha^{n/2-1}}{4^i i!(i-1)!} L^{m-j-1+i}(D)p(\alpha x) d\alpha. \quad (24)$$

Используя полученное значение $J(p)$ вместо последнего слагаемого в формуле (22), находим

$$v_{m-j-1}(x) = L^{m-j-1}(D)p(x) + \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^s |x|_A^{2s} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{s-1} \alpha^{s+n/2-2}}{4^s s!(s-1)!} L^{m-j-1+s}(D)p(\alpha x) d\alpha,$$

что совпадает с формулой (21) при $i = j + 1$. Индукция доказана.

Таким образом, основываясь на (21), мы имеем для функции $v_k(x)$ общее выражение

$$v_k(x) = L^k(D)p(x) + \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^s |x|_A^{2s} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{s-1} \alpha^{s+n/2-2}}{4^s s!(s-1)!} L^{k+s}(D)p(\alpha x) d\alpha,$$

где $k = 0, \dots, m$, которое совпадает с (16). Итак, если для функции $p(x)$ имеет место равенство (15), то функции $v_k(x)$ находятся из (16). Теорема доказана.

Теорема 4. Пусть функция $p \in C^{2m+2}(\Omega)$ – произвольное решение уравнения (14), тогда имеет место представление

$$p(x) = v_0(x; p) + \sum_{k=1}^{\infty} |x|_A^{2k} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{k-1} \alpha^{n/2-1}}{4^k k!(k-1)!} v_k(\alpha x; p) d\alpha, \quad (25)$$

где функции $v_k(x; p)$ определяются из равенств

$$v_0(x; p) = p(x) + \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^s |x|_A^{2s} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{s-1} \alpha^{s+n/2-2}}{4^s s!(s-1)!} L^s(D)p(\alpha x) d\alpha, \\ v_k(x; p) = v_0(x; L^k(D)p), \quad k \in \mathbb{N}. \quad (26)$$

Доказательство. 1^0 . Для оператора $\Lambda = \sum_{i=1}^n x_i \frac{\partial}{\partial x_i}$ и функции $v \in C^1(\Omega)$ при $q \in \mathbb{N}$ верно равенство [7]

$$(\Lambda + s + 1) \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^q \alpha^s}{q!} v(\alpha x) d\alpha = \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{q-1} \alpha^{s+1}}{(q-1)!} v(\alpha x) d\alpha, \quad (27)$$

а при $q = 0$ следующее равенство:

$$(\Lambda + s + 1) \int_0^1 \alpha^s v(\alpha x) d\alpha = v(x). \quad (28)$$

Поэтому из (7) и (10) нетрудно получить

$$L(D) \left(|x|_A^{2s} u(x) \right) = 4s |x|_A^{2s-2} \left(\Lambda + s + \frac{n}{2} - 1 \right) u(x) + |x|_A^{2s} L(D)u(x). \quad (29)$$

2^0 . Покажем, что функции $v_k(x)$, найденные из равенства (26), удовлетворяют уравнению (5). Применим оператор $L(D)$ к обеим частям (26), учитывая при этом, что дифференцирование под знаком суммы законно (суммирование в (25) конечно в силу замечания 2). Обозначая в полученном равенстве $q_k(x) = L^k(D)p(x)$, будем иметь

$$L(D)v_k(x) = L(D)q_k(x) + \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^s L(D) \left(|x|_A^{2s} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{s-1} \alpha^{s-1}}{4^s s!(s-1)!} \alpha^{n/2-1} L^s(D)q_k(\alpha x) d\alpha \right) = \\ = L(D)q_k(x) - \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^{s-1} |x|_A^{2s-2} \left(\Lambda + s + \frac{n}{2} - 1 \right) \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{s-1} \alpha^{s+n/2-2}}{4^{s-1} (s-1)!(s-1)!} L^s(D)q_k(\alpha x) d\alpha + \\ + \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^s |x|_A^{2s} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{s-1} \alpha^{s+n/2}}{4^s s!(s-1)!} L^{s+1}(D)q_k(\alpha x) d\alpha. \quad (30)$$

С помощью равенств (27) и (28) преобразуем первую сумму в выражении справа. Рассмотрим первое слагаемое этой суммы при $s = 1$. Воспользуемся (28) при $s = n/2 - 1$:

$$\left(\Lambda + \frac{n}{2} \right) \int_0^1 \alpha^{n/2-1} L(D)q_k(\alpha x) d\alpha = L(D)q_k(x).$$

К оставшимся слагаемым применим формулу (27) при $s = s + n/2 - 2$, $q = s - 1$, а затем замену индекса суммирования $s \rightarrow s + 1$. Получим

$$\sum_{s=2}^{\infty} (-1)^{s-1} |x|_A^{2s-2} \left(\Lambda + s + \frac{n}{2} - 1 \right) \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{s-1} \alpha^{s+n/2-2}}{4^{s-1} (s-1)! (s-1)!} L^s(D) q_k(\alpha x) d\alpha = \sum_{s=2}^{\infty} (-1)^{s-1} |x|_A^{2s-2} \times$$

$$\times \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{s-2} \alpha^{s+n/2-1}}{4^{s-1} (s-1)! (s-2)!} L^s(D) q_k(\alpha x) d\alpha = \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^s |x|_A^{2s} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{s-1} \alpha^{s+n/2}}{4^s s! (s-1)!} L^{s+1}(D) q_k(\alpha x) d\alpha.$$

Подставляя вычисленное значение первой суммы назад в правую часть (30), видим, что все слагаемые сокращаются, и мы получаем равенство $L(D)v_k(x) = 0, x \in \Omega$.

3⁰. Докажем теперь, что имеет место формула (25), в которой функции $v_k(x)$ находятся из (26). Для этого положим в (25) $p(x) = f(x)$ и подставим выражение для $v_k(x)$ в (25)

$$f(x) = p(x) + \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^s |x|_A^{2s} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{s-1} \alpha^{s+n/2-2}}{4^s s! (s-1)!} L^s(D) p(\alpha x) d\alpha +$$

$$+ \sum_{k=1}^{\infty} |x|_A^{2k} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{k-1} \alpha^{n/2-1}}{4^k k! (k-1)!} L^k(D) p(\alpha x) d\alpha + \sum_{k,s=1}^{\infty} (-1)^s |x|_A^{2(k+s)} \times$$

$$\times \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{k-1} \alpha^{2s+n/2-1}}{4^k k! (k-1)!} \int_0^1 \frac{(1-\beta)^{s-1} \beta^{s+n/2-2}}{4^s s! (s-1)!} L^{k+s}(D) p(\alpha\beta x) d\beta d\alpha. \tag{31}$$

Обозначим последнюю сумму в полученном выражении через $I_1(x)$, т.е.

$$I_1(x) = \sum_{k,s=1}^{\infty} (-1)^s |x|_A^{2(k+s)} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{k-1} \alpha^{2s+n/2-1}}{4^k k! (k-1)!} \int_0^1 \frac{(1-\beta)^{s-1} \beta^{s+n/2-2}}{4^s s! (s-1)!} L^{k+s}(D) p(\alpha\beta x) d\beta d\alpha.$$

Вспомяная (23) видим, что имеет место равенство $I_1(x) = -I(x)$ при $p(x) = L^{m-j-1}(D)p(x)$. Поэтому в соответствии с (24)

$$I_1(x) = - \sum_{s=1}^{\infty} (-1)^s |x|_A^{2s} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{s-1} \alpha^{s+n/2-2}}{4^s s! (s-1)!} L^s(D) p(\alpha x) d\alpha - \sum_{s=1}^{\infty} |x|_A^{2s} \int_0^1 \frac{(1-\alpha)^{s-1} \alpha^{n/2-1}}{4^s s! (s-1)!} L^s(D) p(\alpha x) d\alpha.$$

После подстановки найденного значения выражения $I_1(x)$ в (31) получим тождество $f(x) = p(x)$.

Пример 2. Рассмотрим волновое уравнение

$$D_t^2 u - \Delta u = 0.$$

Для него $L(D) = D_t^2 - \Delta$ и значит $|x|_A^2 = t^2 - \|x\|^2$. Разложим полином $p(t, x) = t^2 + \|x\|^2$ по формуле (25). Для этого найдем волновой полином $v_0(t, x; p)$ из формулы (26). Поскольку $L(D)p(t, x) = (D_t^2 - \Delta)(t^2 + \|x\|^2) = (2 - 2n)$, то имеем

$$v_0(t, x; p) = t^2 + \|x\|^2 - (t^2 - \|x\|^2) \int_0^1 \frac{\alpha^{(n+1)/2-1}}{4} (2 - 2n) d\alpha = t^2 + \|x\|^2 -$$

$$- (t^2 - \|x\|^2) \frac{2}{n+1} \frac{1-n}{2} = t^2 \left(1 + \frac{n-1}{n+1}\right) + \|x\|^2 \left(1 - \frac{n-1}{n+1}\right) \frac{2}{n+1} (nt^2 + \|x\|^2).$$

Нетрудно видеть, что $v_1(t, x; p) = v_0(t, x; L(D)p) = v_0(t, x; 2 - 2n) = 2 - 2n$. Поэтому, по формуле (25) найдем искомое разложение

$$t^2 + \|x\|^2 = \frac{2}{n+1} (nt^2 + \|x\|^2) + (t^2 - \|x\|^2) \int_0^1 \frac{\alpha^{(n+1)/2-1}}{4} (2 - 2n) d\alpha = \frac{2}{n+1} (nt^2 + \|x\|^2) + (t^2 - \|x\|^2) \frac{1-n}{n+1}.$$

Нетрудно убедиться, что полученное равенство представляет собой тождество и полином $nt^2 + \|x\|^2$ – волновой: $(D_t^2 - \Delta)(nt^2 + \|x\|^2) = 2n - 2n = 0$.

Литература

1. Ren, G.B. Almansi decompositions for polyharmonic, polyheat, and polywave functions / G.B. Ren, U. Kähler // *Studia Math.* – 2006. – V. 172, № 1. – P. 91–100.
2. Карачик, В.В. Об одном разложении типа Альманси / В.В. Карачик // *Математические заметки.* – 2008. – Т. 83, № 3. – С. 370–380.
3. Карачик, В.В. О решении неоднородного полигармонического уравнения и неоднородного уравнения Гельмгольца / В.В. Карачик, Н.А. Антропова // *Дифференциальные уравнения.* – 2010. – Т. 46, № 3. – С. 384–395.
4. Karachik, V.V. Polynomial solutions to the systems of partial differential equations with constant coefficients / V.V. Karachik // *Yokohama Mathematical Journal.* – 2000. – V. 47. – P. 121–142.
5. Karachik, V.V. Harmonic polynomials and the divisibility problem / V.V. Karachik // *Proceedings of AMS.* – 1997. – V. 125, № 11. – P. 3257–3258.
6. 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. – V. 287, № 2. – P. 577–592.
7. Карачик В.В. Об одном представлении аналитических функций гармоническими / В.В. Карачик // *Математические труды.* – 2007. – Т. 10, № 2. – С. 142–162.

Поступила в редакцию 26 апреля 2010 г.

ALMANSI DECOMPOSITIONS FOR NON-SINGULAR SECOND ORDER PARTIAL DIFFERENTIAL OPERATORS

Generalization of the known Almansi decomposition formula to non-singular second order partial differential operators with constant coefficients is considered. A simple formula for determining the first harmonic function in the classical Almansi decomposition is given.

Keywords: Almansi decomposition, second order partial differential operators, polynomial solutions.

Karachik Valeriy Valentinovich is Dr.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Mathematical Analysis Department, the Mechanical-Technological Faculty, South Ural State University.

Карачик Валерий Валентинович – профессор, доктор физико-математических наук, кафедры математического анализа, механико-математический факультет, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: karachik@susu.ru

ОБ ОТСУТСТВИИ МАКСИМИННЫХ СТРАТЕГИЙ В ОДНОЙ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ИГРЕ

К.Н. Кудрявцев

Рассмотрен аналог леммы о мажоранте из [1], с помощью которого для дифференциальной позиционной кооперативной линейно-квадратичной игры двух лиц при неопределенности найдены ограничения на функции выигрыша, при которых у игроков не существует «индивидуальных» максиминных стратегий.

Ключевые слова: дифференциальные игры, кооперативные игры, неопределенность, риск.

1. Формализация игры

Рассматривается дифференциальная позиционная кооперативная линейно-квадратичная игра двух лиц с побочными платежами и при неопределенности, которая отождествляется с упорядоченной пятеркой

$$\langle \{1,2\}, \Sigma, \{\mathcal{A}_i\}_{i=1,2}, \mathcal{Z}, \{\mathcal{J}_i(U, Z, t_0, x_0)\}_{i=1,2} \rangle, \quad (1)$$

В (1) участвуют два игрока с порядковыми номерами 1 и 2. Изменение (во времени t) управляемой системы Σ описывается линейным дифференциальным уравнением

$$\dot{x} = A(t)x + u_1 + u_2 + A_1(t)z + a(t), \quad x(t_0) = x_0. \quad (2)$$

Здесь время $t \in [t_0, \vartheta]$, постоянные $\vartheta > t_0 \geq 0$; фазовый вектор $x \in \mathbb{R}^n$, (t, x) – позиция игры, (t_0, x_0) – начальная позиция; неопределенный фактор $z \in \mathbb{R}^m$; матрицы соответствующих размерностей $A(t)$, $A_1(t)$ и n -вектор $a(t)$ непрерывны на $[0, \vartheta]$ (этот факт в дальнейшем обозначается $A(\cdot) \in C_{n \times n}[0, \vartheta]$, $A_1(\cdot) \in C_{n \times m}[0, \vartheta]$, $a(\cdot) \in C_n[0, \vartheta]$); $u_i \in \mathbb{R}^n$ – управляющее воздействие i -го игрока ($i = 1, 2$).

Стратегии i -го игрока U_i отождествляем с линейными функциями вида $u_i(t, x, z) = P_i(t)x + Q_i(t)z + q_i(t)$, где $P_i(\cdot) \in C_{n \times n}[0, \vartheta]$, $Q_i(\cdot) \in C_{n \times m}[0, \vartheta]$, $q_i(\cdot) \in C_n[0, \vartheta]$, и тогда выбор i -ым игроком своей стратегии сводится к выбору конкретных непрерывных на $[0, \vartheta]$ матриц $P_i(t)$, $Q_i(t)$ и вектора $q_i(t)$; поэтому множество стратегий i -го игрока ($i = 1, 2$) имеет вид:

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_i = \{ & U_i \div u_i(t, x, z) \mid u_i(t, x, z) = P_i(t)x + Q_i(t)z + q_i(t), \\ & \forall P_i(\cdot) \in C_{n \times n}[0, \vartheta], Q_i(\cdot) \in C_{n \times m}[0, \vartheta], q_i(\cdot) \in C_n[0, \vartheta] \}. \end{aligned} \quad (3)$$

Заметим, что стратегии указанного вида впервые использовались в минимаксной дифференциальной антагонистической игре академиком Н.Н. Красовским в [4] и названы там контрстратегиями.

Наконец, управляемая система Σ , как правило, подвергается неожиданным, трудно прогнозируемым возмущениям как извне (появление конкурентов, изменение спроса на товары, банкротство поставщика и т.п.), так и изнутри (поломка и замена оборудования, болезни и забастовки персонала, несовпадение планируемых сроков пуска нового оборудования с реальными сроками и т.д.). Для системы Σ данный факт будет выражаться в реализациях в каждый момент времени $t \in [t_0, \vartheta]$ численных значений некоторого векторного параметра $z \in \mathbb{R}^m$. Будем предполагать (см., например, модель Эванса [5]), что игрокам известна динамика (изменение во времени t) вектора $z[t]$ на отрезке $[t_0, \vartheta]$. Пусть это изменение описывается векторным линейным неоднородным дифференциальным уравнением

$$\dot{z} = B(t)z + b(t), \quad z[t_0] = z_0, \quad (4)$$

где $m \times m$ -матрица $B(\cdot) \in C_{m \times m}[0, \vartheta]$ и m -вектор $b(\cdot) \in C_m[0, \vartheta]$.

Итак, неопределенность Z будем отождествлять с m -вектор-функцией $z[\cdot] = \{z[t], t \in [t_0, \vartheta]\}$ (обозначаем $Z \div z[\cdot]$), являющейся решением (4) с начальным условием $z[t_0] = z_0 \in \mathbb{R}^m$.

Множество \mathcal{Z} неопределенностей Z получаем, когда t_0 «пробегают» все значения из промежутка $[0, \vartheta]$, а z_0 – точки из \mathbb{R}^m .

Таким образом, для построения конкретной неопределенности достаточно знать ее начальное значение $z[t_0] = z_0 \in \mathbb{R}^m$, а затем найти решение уравнения (4). Здесь фактически неопределенностью является начальное значение $z_0 \in \mathbb{R}^m$, а возможные скачки неопределенности (например, скачки цены товара на рынке сбыта) происходят до момента времени t_0 . Начиная же с t_0 до момента ϑ изменение неопределенности Z происходит в соответствии с уравнением (4). Если промежуток $[t_0, \vartheta]$ достаточно мал, то такой факт полностью соответствует математической модели Эванса изменения на рынке цены товара в зависимости от спроса и предложения [5].

«Партия» дифференциальной игры (1) «развивается» следующим образом. Игроки, действуя сообща, обмениваясь информацией, согласованно договариваются о выборе своих стратегий $U_i^* \in \mathfrak{A}_i$, $U_i^* \div u_i^*(t, x, z) = P_i^*(t)x + Q_i^*(t)z + q_i^*(t)$ ($i=1, 2$). В результате образуется ситуация

$$U^* = (U_1^*, U_2^*) \in \mathfrak{A} = \mathfrak{A}_1 \times \mathfrak{A}_2.$$

Независимо от этого выбора реализуется конкретная неопределенность $Z^* \in \mathcal{Z}$, $Z^* \div z^*[t]$. Тогда система (2) при $u_i = u_i^*(t, x, z)$ ($i=1, 2$) и $z = z^*[t]$ превращается в векторное линейное неоднородное дифференциальное уравнение с непрерывными (по $t \in [t_0, \vartheta]$) коэффициентами

$$\dot{x} = [A(t) + P_1^*(t) + P_2^*(t)]x + [A_1(t) + Q_1^*(t) + Q_2^*(t)]z^*[t] + a(t) + q_1^*(t) + q_2^*(t), \quad x(t_0) = x_0.$$

Такое уравнение имеет [6, с.29] единственное, непрерывно дифференцируемое решение $x^*(t)$, продолжимое на весь интервал игры $[t_0, \vartheta]$.

По найденному решению $x^*(t)$ и неопределенности $z^*[t]$, $t \in [t_0, \vartheta]$ строится реализация выбранных игроками стратегий $U_i^* \div u_i^*(t, x, z)$ ($i=1, 2$), а именно, определенная при каждом $t \in [t_0, \vartheta]$ суперпозиция

$$u_i^*[t] = u_i^*(t, x^*(t), z^*[t]) = P_i^*(t)x^*(t) + Q_i^*(t)z^*[t] + q_i^*(t) \quad (i=1, 2).$$

На четверках непрерывных вектор-функций

$$(x^*(\cdot), u_1^*[\cdot], u_2^*[\cdot], z^*[\cdot]) = \{x^*(t), u_1^*[t], u_2^*[t], z^*[t] \mid t \in [t_0, \vartheta]\}$$

определена функция выигрыша i -го игрока, заданная квадратичным функционалом

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_i(U, Z, t_0, x_0) = & x'(\vartheta)C_i x(\vartheta) + z'[\vartheta]C_i^{(1)}z[\vartheta] + \\ & + \int_{t_0}^{\vartheta} \left\{ \sum_{j=1}^2 u_j'[t]D_{ij}u_j[t] + z'[t]L_i z[t] + x'(t)G_i x(t) \right\} dt \quad (i=1, 2), \end{aligned} \quad (5)$$

где использованы априори заданные постоянные симметричные $n \times n$ матрицы C_i , D_{ij} , G_i и $m \times m$ матрицы L_i , $C_i^{(1)}$; штрих сверху означает операцию транспонирования. Значение функции выигрыша $\mathcal{J}_i(U^*, Z^*, t_0, x_0)$ называется предварительным выигрышем i -го игрока.

Следуя подходу принципа минимаксного сожаления [7], для функции выигрыша (5) строится [2] функционал риска $\Phi_i(U, Z, t_0, x_0)$.

На втором этапе игроки перераспределяют между собой полученные суммарный выигрыш

$$\mathcal{J}_1(U^*, Z^*, t_0, x_0) + \mathcal{J}_2(U^*, Z^*, t_0, x_0)$$

и суммарный риск

$$\Phi_1(U^*, Z^*, t_0, x_0) + \Phi_2(U^*, Z^*, t_0, x_0).$$

Итак, согласно описанному процессу «протекания» кооперативной дифференциальной игры с побочными платежами, каждый игрок согласованно с партнером формирует свое решение – стратегию $U_i \in \mathcal{A}_i$ ($i=1,2$), а затем перераспределяет свой суммарный выигрыш так, чтобы его окончательный выигрыш был по возможности большим, а перераспределенный риск (значение функции риска) по возможности меньше. При этом игроки должны учитывать возможность реализации любой неопределенности $Z \in \mathcal{Z}$.

Для рассмотренной игры (1) в [3] определено следующее понятие гарантированного по выигрышам и рискам решения (ГВРР).

Определение. В дифференциальной позиционной кооперативной игре двух лиц с побочными платежами при неопределенности (1.1) тройку $(U^*, \mathcal{J}^*[t_0, x_0], \Phi^*[t_0, x_0])$ назовем гарантированным по выигрышам и рискам решением (ГВРР) игры с начальной позицией $(t_0, x_0) \in [0, \vartheta) \times \mathbb{R}^n$, если существует неопределенность $Z^* \in \mathcal{Z}$, при которой выполнены следующие три условия:

1⁰) условие коллективной рациональности

$$\begin{aligned} \max_{U \in \mathcal{A}} \sum_{i=1}^2 \mathcal{J}_i(U, Z, t_0, x_0) &= \sum_{i=1}^2 \mathcal{J}_i(U^*, Z, t_0, x_0), \\ \min_{U \in \mathcal{A}} \sum_{i=1}^2 \Phi_i(U, Z, t_0, x_0) &= \sum_{i=1}^2 \Phi_i(U^*, Z, t_0, x_0); \end{aligned}$$

2⁰) условие «неухудшаемости» суммарного суммарного выигрыша и риска

$$\begin{aligned} \min_{U \in \mathcal{A}} \sum_{i=1}^2 [\mathcal{J}_i(U^*, Z, t_0, x_0) - \Phi_i(U^*, Z, t_0, x_0)] &= \\ &= \sum_{i=1}^2 [\mathcal{J}_i(U^*, Z^*, t_0, x_0) - \Phi_i(U^*, Z^*, t_0, x_0)]; \end{aligned}$$

3⁰) условие индивидуальной рациональности

для всех $Z \in \mathcal{Z}$ и $(t_0, x_0) \in [0, \vartheta) \times \mathbb{R}^n$ справедлива система из четырех неравенств

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_i^*[Z, t_0, x_0] &\geq \max_{U_i \in \mathcal{A}_i} \min_{U_j \in \mathcal{A}_j} \mathcal{J}_i(U_1, U_2, Z, t_0, x_0), \\ \Phi_i^*[Z, t_0, x_0] &\geq \min_{U_i \in \mathcal{A}_i} \max_{U_j \in \mathcal{A}_j} \Phi_i(U_1, U_2, Z, t_0, x_0) \quad (i, j = 1, 2; i \neq j), \end{aligned} \tag{6}$$

где

$$\sum_{i=1}^2 \mathcal{J}_i(U^*, Z, t_0, x_0) = \sum_{i=1}^2 \mathcal{J}_i^*[Z, t_0, x_0] \quad \wedge \quad \sum_{i=1}^2 \Phi_i(U^*, Z, t_0, x_0) = \sum_{i=1}^2 \Phi_i^*[Z, t_0, x_0];$$

при этом пару

$$\mathcal{J}_i^*[t_0, x_0] = (\mathcal{J}_1^*[Z^*, t_0, x_0], \mathcal{J}_2^*[Z^*, t_0, x_0])$$

назовем гарантированным векторным дележом, пару

$$\Phi_i^*[t_0, x_0] = (\Phi_1^*[Z^*, t_0, x_0], \Phi_2^*[Z^*, t_0, x_0])$$

– гарантированным векторным риском, а $U^* = (U_1^*, U_2^*)$ – ситуацией, гарантирующей эти дележи и риски в ДКИН (1) с побочными платежами и начальной позицией (t_0, x_0) .

Замечание. 1. Требование 1⁰ определения ГВРР выделяет для каждой неопределенности $Z \in \mathcal{Z}$ и каждой начальной позиции $(t_0, x_0) \in [0, \vartheta] \times \mathbb{R}^n$ ту сумму выигрышей $\sum_{i=1}^2 \mathcal{J}_i(U^*, Z, t_0, x_0)$ и сумму рисков $\sum_{i=1}^2 \Phi_i(U^*, Z, t_0, x_0)$, которые делятся между игроками так, что первому распределяется часть суммарного выигрыша $\mathcal{J}_1^*[Z^*, t_0, x_0]$ и часть суммарного риска $\Phi_1^*[Z^*, t_0, x_0]$, второму соответственно $\mathcal{J}_2^*[Z^*, t_0, x_0]$ и $\Phi_2^*[Z^*, t_0, x_0]$. При этом распределении условия индивидуальной рациональности обеспечивают обоим игрокам выигрыши не меньшие, и риски не большие тех, которые они могли бы «обеспечить себе», действуя самостоятельно и используя свои максиминные и минимаксные стратегии.

2. Лемма о мажоранте

Ниже определены условия, при которых не существуют максимины и минимаксы из (6). При выполнении данных условий между игроками допустимо любое распределение суммарного гарантированного дележа $\mathcal{J}_1(U^*, Z^*, t_0, x_0) + \mathcal{J}_2(U^*, Z^*, t_0, x_0)$ и суммарного гарантированного риска $\Phi_1(U^*, Z^*, t_0, x_0) + \Phi_2(U^*, Z^*, t_0, x_0)$.

Рассмотрим квадратичный функционал, определенный в (5), а именно

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_1(U, Z, t_0, x_0) = & x'(\vartheta)C_1x(\vartheta) + z'[\vartheta]C_1^{(1)}z[\vartheta] + \\ & + \int_{t_0}^{\vartheta} \{u_1'[t]D_{11}u_1[t] + u_2'[t]D_{12}u_2[t] + z'[t]L_1z[t] + x'(t)G_1x(t)\} dt \end{aligned} \tag{7}$$

при рассмотренных в (2)–(4) ограничениях.

Лемма. Если в (7) матрица $D_{12} < 0$ (т.е. соответствующая квадратичная форма определенно отрицательная), то при любом выборе стратегий $U_i \in \mathcal{A}_i$ ($i=1,2$) и начальной позиции $(t_0, x_0) \in [0, \vartheta] \times \{\mathbb{R}^n \setminus 0_n\}$, $z[t_0] = z_0 \in \mathbb{R}^m$ существует «своя» стратегия $\bar{U}_2 \in \mathcal{A}_2$, при которой

$$J_1(U_1, U_2, Z, t_0, x_0) > J_1(U_1, \bar{U}_2, Z, t_0, x_0). \tag{8}$$

Доказательство разобьем на три этапа. На первом – для задачи (8), (2) – (4) при $U_i \div u_i(t, x, z) = P_i(t)x + Q_i(t)z + q_i(t)$ ($i=1,2$) построим функцию Беллмана $V^*(t, x, z)$, на втором – установим равенство

$$J_1(U_1, U_2, Z, t_0, x_0) = V(t_0, x_0, z_0), \tag{9}$$

на третьем – докажем строгое неравенство (8).

Первый этап. Для задачи (8), (2) – (4) найдем функцию Беллмана. Пусть фиксированы $(U_1^*, U_2^*) \div (u_1^*(t, x, z), u_2^*(t, x, z)) = (P_1^*(t)x + Q_1^*(t)z + q_1^*(t), P_2^*(t)x + Q_2^*(t)z + q_2^*(t))$ – какая-либо ситуация из $\mathcal{A}_1 \times \mathcal{A}_2$ и $(t_0, x_0) \in [0, \vartheta] \times \{\mathbb{R}^n \setminus 0_n\}$, $z[t_0] = z_0 \in \mathbb{R}^m$ – произвольная начальная позиция.

Введем функцию

$$\begin{aligned} W(t, x, u_1, u_2, z, V) = & \frac{\partial V}{\partial t} + \left[\frac{\partial V}{\partial x} \right]' [A(t)x + u_1 + u_2 + A_1(t)z + a(t)] + \\ & + \left[\frac{\partial V}{\partial z} \right]' [B(t)z + b(t)] + u_1 D_{11} u_1 + u_2 D_{12} u_2 + x' G_1 x + z' L_1 z. \end{aligned} \tag{10}$$

Функцию Беллмана $V^*(t, x, z)$ определим из условий:

$$W(t, x, u_1^*(t, x, z), u_2^*(t, x, z), z, V(t, x, z)) = 0 \quad \forall (t, x, z) \in [0, \vartheta] \times \mathbb{R}^{n+m}, \tag{11}$$

$$V(\vartheta, x, z) = x' C_1 x + z' C_1^{(1)} z \quad \forall x \in \mathbb{R}^n, z \in \mathbb{R}^m. \tag{12}$$

Ищем решение (11), (12) в виде

$$V(t, x, z) = x'\Theta(t)x + 2x'\Xi(t)z + z'\zeta(t)z + 2x'\xi(t) + 2z'\eta(t) + \omega(t), \quad (13)$$

где соответствующих размерностей матрицы $\Theta(t)$, $\Xi(t)$, $\zeta(t)$, вектора $\xi(t)$, $\eta(t)$ и скалярная функция $\omega(t)$ подлежат определению; предполагаем лишь пока, что $\Theta(t)$ и $\zeta(t)$ симметричны.

Подставив (13) в (11) – (12), с учетом вида U_i^* ($i=1,2$) получаем

$$\begin{aligned} W(t, x, u_1^*(t, x, z), u_2^*(t, x, z), z, V(t, x, z)) &= W[t, x, z] = \\ &= x'\dot{\Theta}x + 2x'\dot{\Xi}z + z'\dot{\zeta}z + 2x'\dot{\xi} + 2z'\dot{\eta} + \dot{\omega} + \\ &+ 2[x'\Theta + z'\Xi' + \xi'] \left[A(t)x + P_1^*(t)x + Q_1^*(t)z + q_1^*(t) + P_2^*(t)x + Q_2^*(t)z + q_2^*(t) + A_1(t)z + a(t) \right] + \\ &+ 2[x'\Xi + z'\zeta + \eta'] [B(t)z + b(t)] + \\ &+ [x'(P_1^*(t))' + z'(Q_1^*(t))' + (q_1^*(t))'] D_{11} [P_1^*(t)x + Q_1^*(t)z + q_1^*(t)] + \\ &+ [x'(P_2^*(t))' + z'(Q_2^*(t))' + (q_2^*(t))'] D_{12} [P_2^*(t)x + Q_2^*(t)z + q_2^*(t)] + x'G_1x + z'L_1z = 0. \end{aligned}$$

Тождества (11), (12) имеют место, если $\Theta(t)$, $\Xi(t)$, $\zeta(t)$, $\xi(t)$, $\eta(t)$, $\omega(t)$ является решением системы

$$\left\{ \begin{aligned} \dot{\Theta} + \Theta [A(t) + P_1^*(t) + P_2^*(t)] + [A'(t) + [P_1^*(t)]' + [P_2^*(t)]'] \Theta + \\ + [P_1^*(t)]' D_{11} P_1^*(t) + [P_2^*(t)]' D_{12} P_2^*(t) + G_1 = 0_{n \times n}; \\ \dot{\Xi} + \Theta [Q_1^*(t) + Q_2^*(t) + A_1(t)] + [A(t) + P_1^*(t) + P_2^*(t)] \Xi + \\ + \Xi B(t) + [P_1^*(t)]' D_{11} Q_1^*(t) + [P_2^*(t)]' D_{12} Q_2^*(t) = 0_{m \times n}; \\ \dot{\zeta} + \Xi' [Q_1^*(t) + Q_2^*(t) + A_1(t)] + \zeta B(t) + \\ + [Q_1^*(t)]' D_{11} Q_1^*(t) + [Q_2^*(t)]' D_{12} Q_2^*(t) + L_1 = 0_{m \times m}; \\ \dot{\xi} + \Theta [q_1^*(t) + q_2^*(t) + a(t)] + [A(t) + [P_1^*(t)]' + [P_2^*(t)]'] \xi + \\ + \Xi b(t) + [P_1^*(t)]' D_{11} q_1^*(t) + [P_2^*(t)]' D_{12} q_2^*(t) = 0_n; \\ \dot{\eta} + \Xi' [q_1^*(t) + q_2^*(t) + a(t)] + [Q_1^*(t)]' + [Q_2^*(t)]' + A_1'(t) \eta + \\ + \zeta b(t) + B'(t)\eta + [Q_1^*(t)]' D_{11} q_1^*(t) + [Q_2^*(t)]' D_{12} q_2^*(t) = 0_m; \\ \dot{\omega} + 2\xi' [q_1^*(t) + q_2^*(t) + a(t)] + 2\eta' b(t) + [q_1^*(t)]' D_{11} q_1^*(t) + [q_2^*(t)]' D_{12} q_2^*(t) = 0; \\ \Theta(\vartheta) = C_1, \quad \Xi(\vartheta) = 0_{m \times n}, \quad \zeta(\vartheta) = C_1^{(1)}, \\ \xi(\vartheta) = 0_n, \quad \eta(\vartheta) = 0_m, \quad \omega(\vartheta) = 0. \end{aligned} \right. \quad (14)$$

Система (14) линейная неоднородная с непрерывными по $t \in [0, \vartheta]$ коэффициентами. Поэтому, согласно [6, с. 29], (14) имеет единственное непрерывное решение $\Theta^*(t)$, $\Xi^*(t)$, $\zeta^*(t)$, $\xi^*(t)$, $\eta^*(t)$, $\omega^*(t)$, продолжимое на $[0, \vartheta]$.

Таким образом, доказано существование функции

$$V^*(t, x, z) = x'\Theta^*(t)x + 2x'\Xi^*(t)z + z'\zeta^*(t)z + 2x'\xi^*(t) + 2z'\eta^*(t) + \omega^*(t),$$

определенной при всех $(t, x, z) \in [0, \vartheta] \times \mathbb{R}^{n+m}$ и удовлетворяющей равенствам:

$$W(t, x, u_1^*(t, x, z), u_2^*(t, x, z), z, V^*(t, x, z)) = 0 \quad \forall (t, x, z) \in [0, \vartheta] \times \mathbb{R}^{n+m}, \quad (15)$$

$$V^*(\vartheta, x, z) = x'C_1x + z'C_1^{(1)}z \quad \forall x \in \mathbb{R}^n, z \in \mathbb{R}^m. \quad (16)$$

Второй этап. Установим равенство

$$J_1(U_1^*, U_2^*, Z, t_0, x_0) = V^*(t_0, x_0, z_0), \quad (17)$$

где ситуация

$$(U_1^*, U_2^*) \div (u_1^*(t, x, z), u_2^*(t, x, z)) = (P_1^*(t)x + Q_1^*(t)z + q_1^*(t), P_2^*(t)x + Q_2^*(t)z + q_2^*(t))$$

та же, что применялась на первом этапе доказательства, а функция $V^*(t, x, z)$ была построена выше. Пусть $x(t)$, $0 \leq t \leq \vartheta$ – решение (2) при $u_i = u_i^*(t, x, z) = P_i^*(t)x + Q_i^*(t)z + q_i^*(t)$, $(i=1,2)$, а $z[t]$, $t_0 \leq t \leq \vartheta$ – решение (4). Подставляя $x = x(t)$ и $z = z[t]$ в (15), получим, что при всех $t \in [t_0, \vartheta]$

$$0 = W[t] = \left\{ \frac{\partial V^*(t, x, z)}{\partial t} + \left[\frac{\partial V^*(t, x, z)}{\partial x} \right]' [A(t)x + u_1^*(t, x, z) + u_2^*(t, x, z) + A_1(t)z + a(t)] + \left[\frac{\partial V^*(t, x, z)}{\partial z} \right]' [B(t)z + b(t)] \right\}_{x=x(t), z=z[t]} + \left\{ [u_1^*(t, x, z)]' D_{11} u_1^*(t, x, z) + [u_2^*(t, x, z)]' D_{12} u_2^*(t, x, z) + x' G_1 x + z' L_1 z \right\}. \quad (18)$$

Найдем полную производную от найденной на первом этапе функции Беллмана $V^*(t, x, z)$ в силу (2), (4) при $u_i = u_i^*(t, x, z) = P_i^*(t)x + Q_i^*(t)z + q_i^*(t)$, $(i=1,2)$, т.е. в силу системы

$$\begin{cases} \dot{x} = A(t)x + u_1^*(t, x, z) + u_2^*(t, x, z) + A_1(t)z + a(t), & x(t_0) = x_0, \\ \dot{z} = B(t)z + b(t), & z[t_0] = z_0. \end{cases} \quad (19)$$

Тогда имеет место цепочка равенств

$$\begin{aligned} \frac{dV^*(t, x, z)}{dt} \Big|_{(19)} &= \frac{\partial V^*(t, x(t), z[t])}{\partial t} + \left[\frac{\partial V^*(t, x(t), z[t])}{\partial x} \right]' \frac{dx(t)}{dt} \Big|_{(19)} + \\ &+ \left[\frac{\partial V^*(t, x(t), z[t])}{\partial z} \right]' \frac{dz[t]}{dt} \Big|_{(19)} = \left\{ \frac{\partial V^*(t, x, z)}{\partial t} + \left[\frac{\partial V^*(t, x, z)}{\partial x} \right]' [A(t)x + u_1^*(t, x, z) + u_2^*(t, x, z) + A_1(t)z + a(t)] + \left[\frac{\partial V^*(t, x, z)}{\partial z} \right]' [B(t)z + b(t)] \right\}_{x=x(t), z=z[t]}. \end{aligned} \quad (20)$$

Используя (20) и тождество (18), представим $W[t]$ в виде

$$W[t] = \frac{dV^*(t, x(t), z[t])}{dt} + (u_1^*[t])' D_{11} u_1^*[t] + (u_2^*[t])' D_{12} u_2^*[t] + x'(t) G_1 x(t) + z'[t] L_1 z[t], \quad \forall t \in [t_0, \vartheta], \quad (21)$$

где $u_i^*[t] = u_i^*(t, x(t), z[t])$ $(i=1,2)$. Наконец, согласно (16)

$$V^*(\vartheta, x(\vartheta), z[\vartheta]) = x'(\vartheta) C_1 x(\vartheta) + z'[\vartheta] C_1^{(1)} z[\vartheta]. \quad (22)$$

Интегрируя обе части (18) в пределах от t_0 до ϑ и учитывая (21), (7) и (22), получаем

$$0 = \int_{t_0}^{\vartheta} W^*[t] dt = J_1(U_1^*, U_2^*, Z, t_0, x_0) - V(t_0, x_0, z_0). \quad (23)$$

Отсюда следует (17).

Третий этап. Возьмем теперь стратегию $\bar{U}_2 \div \bar{u}_2(t, x) = \beta e$, где $\beta = \text{const} > 0$ определим ниже, а все компоненты n -вектора e равны единице. Тогда

$$\begin{aligned} \bar{W}(t, x, u_1^*(t, x, z), \bar{u}_2(t, x), z, V(t, x, z)) = \\ = x' \dot{\Theta}(t)x + 2x' \dot{\Xi}(t)z + z' \dot{\zeta}(t)z + 2x' \dot{\xi}(t) + 2z' \dot{\eta}(t) + \dot{\omega}(t) + \\ + 2[x' \Theta(t) + z' \Xi(t) + \xi'(t)] [A(t)x + P_1^*(t)x + Q_1^*(t)z + q_1^*(t) + \\ + \beta e + A_1(t)z + a(t)] + 2[x' \Xi(t) + z' \zeta(t) + \eta'(t)] [B(t)z + b(t)] + \\ + [x'(P_1^*(t)) + z'(Q_1^*(t)) + (q_1^*(t))] D_{11} [P_1^*(t)x + Q_1^*(t)z + q_1^*(t)] + \\ + \beta^2 a' D_{12} e + x' G_1 x + z' L_1 z. \end{aligned}$$

Обозначим через $\bar{x}(t)$ и $z[t]$ – решение системы (2), (4) при $u_1 = u_1^*(t, x, z)$, $u_2 = \beta e$. Тогда

$$\begin{aligned} W[t, \beta] = \bar{W}(t, \bar{x}(t), u_1^*(t, \bar{x}(t), z[t]), \bar{u}_2(t, \bar{x}(t)), z[t], V(t, \bar{x}(t), z[t])) = \\ = \varphi_1(t) + \beta \varphi_2(t) e + \beta^2 e' D_{12} e, \end{aligned}$$

где $\varphi_j(t)$ ($j = 1, 2$) – непрерывные на $[0, \vartheta]$ функции.

Так как $D_{12} < 0$, то $e' D_{12} e < -\mu e' e$, где $-\mu = \text{const} < 0$ – наибольший корень характеристического уравнения $\det[D_{12} - \lambda E_n] = 0$. Так как все функции $\varphi_j(t)$ непрерывны на $[0, \vartheta]$, то существует постоянная M такая, что $\max_{j=1,2} (\varphi_j(t)) = M$. Поэтому существует $\beta^* = \text{const} > 0$ такая, что

$$M + \beta^* M < -(\beta^*)^2 \mu n,$$

откуда

$$W[t, \beta^*] < 0 \quad \forall t \in [0, \vartheta].$$

Наконец, отсюда

$$\int_{t_0}^{\vartheta} W[t, \beta^*] dt = J_1(U_1^*, \bar{U}_2, Z, t_0, x_0) - V(t_0, x_0, z_0) < 0$$

и

$$J_1(U_1^*, \bar{U}_2, Z, t_0, x_0) < V(t_0, x_0, z_0).$$

Тогда согласно (23),

$$J_1(U_1^*, \bar{U}_2, Z, t_0, x_0) < J_1(U_1^*, U_2^*, Z, t_0, x_0),$$

т.е. удалось найти стратегию $\bar{U}_2 \in \mathfrak{A}_2$ второго игрока такую, что имеет место неравенство (8), что и требовалось доказать.

Замечание 2. Как следует из доказанной выше леммы, если матрица $D_{12} < 0$, то не существует минимума $\min_{U_2 \in \mathfrak{A}_2} J_1(U_1, U_2, Z, t_0, x_0)$, а следовательно, и применяемого в (6) максимина

$$\max_{U_1 \in \mathfrak{A}_1} \min_{U_2 \in \mathfrak{A}_2} J_1(U_1, U_2, Z^*, t_0, x_0).$$

Полностью аналогично доказывается, что при $D_{21} < 0$ не существует применяемого в (6) максимина

$$\max_{U_2 \in \mathfrak{A}_2} \min_{U_1 \in \mathfrak{A}_1} J_2(U_1, U_2, Z^*, t_0, x_0).$$

Таким образом, при выполнении ограничений $D_{12} < 0$ и $D_{21} < 0$ в функции выигрыша (5) у игроков в бескоалиционном варианте игры (1) не существует «индивидуальных» максиминных стратегий. А для ГВРР кооперативного варианта (1) с возможностью побочных платежей при выполнении данных условий допустимо любое перераспределение суммарного гарантированного

дележа $\mathcal{J}_1(U^*, Z^*, t_0, x_0) + \mathcal{J}_2(U^*, Z^*, t_0, x_0)$ и суммарного гарантированного риска $\Phi_1(U^*, Z^*, t_0, x_0) + \Phi_2(U^*, Z^*, t_0, x_0)$.

Литература

1. Жуковский, В.И. Кооперативные игры при неопределенности и их приложения / В.И. Жуковский. – М.: Эдиториал УРСС, 1999. – 340 с.
2. Кудрявцев, К.Н. Функции риска в одной кооперативной дифференциальной игре / К.Н. Кудрявцев // Информационные технологии моделирования и управления. – Воронеж: «Научная книга», 2008. – В. 6 (49). – С. 665–674.
3. Кудрявцев, К.Н. О гарантированных по выигрышам и рискам решениях в некоторых кооперативных играх / К.Н. Кудрявцев // Наука ЮУрГУ: материалы 61-й научной конференции. Секция естественно-научных и гуманитарных наук. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 2009. – Т. 2. – С. 149–153.
4. Красовский, Н.Н. Позиционные дифференциальные игры / Н.Н. Красовский, А.И. Субботин. – М.: Наука, 1974. – 455 с.
5. Колемаев, В.А. Математическая экономика / В.А. Колемаев. – М.: ЮНИТИ, 2002.
6. Понтрягин, Л.С. Обыкновенные дифференциальные уравнения / Л.С. Понтрягин. – М.: ГИФМЛ, 1961. – 212 с.
7. Savage, L.Y. The theory of statistical decision / L.Y. Savage // J. American Statistic Association. – 1951. – № 46. – P. 55–67.

ABOUT ABSENCE MAXIMIN STRATEGY IN TO ONE DIFFERENTIAL GAME

In this article, we consider cooperative games with side payments under uncertainly. We formalize and prove existence of such game solution, guaranteed for winnings and risk.

Keywords: differential games, cooperative games, uncertainly, risk.

Kudryavtsev Konstantin Nicolaevich is Senior Teacher of the Mathematical Analysis Department, the Mechanical-Technological Faculty, South Ural State University.

Кудрявцев Константин Николаевич – старший преподаватель, кафедра математического анализа, механико-математический факультет, Южно-Уральский государственный университет.
e-mail: kudrk@mail333.com

О РЕШЕНИИ ОДНОЙ ГРАНИЧНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ПАРАБОЛИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Е.В. Табаринцева

Рассматривается задача восстановления граничных условий третьего рода по дополнительной информации о решении параболического уравнения. Рассматривается метод приближенного решения поставленной задачи с выбором параметра регуляризации по схеме М.М. Лаврентьева [1] и с использованием одной из схем апостериорного выбора параметра регуляризации. Получена точная по порядку оценка погрешности построенного приближенного решения на одном из классов равномерной регуляризации.

Ключевые слова: обратная задача, метод приближенного решения, оценка погрешности.

Постановка задачи

Рассматривается задача восстановления функции $z(t) = u(1, t) + h_1 u_x(1, t)$, $z(t) \in L_2[0, \infty)$ (граничного условия третьего рода), где функция $u(x, t)$ удовлетворяет условиям:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - a(x)u \quad (0 < x < 1; t > 0), \quad u(x, 0) = 0; \quad u(0, t) + h_0 u_x(0, t) = 0 \quad (1)$$

и дополнительному условию

$$u(x_0, t) = p(t), \quad x_0 \in (0, 1), \quad t > 0. \quad (2)$$

Здесь $a(x) \in C^2[0, 1]$, $a(x) \geq 0$, h_0, h_1 – заданные постоянные, $u(\cdot, t) \in C^2(0, 1) \cap C([0, 1])$; $u(x, \cdot) \in W_2^1(0, \infty)$.

Рассматривая вспомогательную «прямую» задачу

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - a(x)u, \\ u(x, 0) &= 0; \quad u(0, t) + h_0 u_x(0, t) = 0; \quad u(x_0, t) = p(t), \end{aligned}$$

где $a(x) \in C^2[0, 1]$, $x \in (0, x_0)$, $t > 0$, $u(\cdot, t) \in C^2(0, x_0) \cap C([0, x_0])$; $u(x, \cdot) \in W_2^1(0, \infty)$, определим функцию $q(t) = u_x(x_0, t)$. Следовательно, исходная задача сведется к задаче восстановления функций $v(t) = u(1, t)$ и $w(t) = u_x(1, t)$, где $u(x, t)$ удовлетворяет условиям:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - a(x)u, \quad u(x, 0) = 0; \quad u(x_0, t) = p(t); \quad u_x(x_0, t) = q(t), \quad (3)$$

$x \in (x_0, 1)$, $t > 0$.

Сведение задачи (3) к задаче вычисления значений неограниченного оператора

Пусть функции $p(t), q(t), p'(t), q'(t)$ в задаче (3) принадлежат $L_2(0, \infty)$. Рассмотрим вспомогательную прямую задачу

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} &= \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} - a(x)u, \\ u(x, 0) &= 0; \quad u(x_0, t) = p(t); \quad u(1, t) = v(t), \end{aligned} \quad (4)$$

$x \in (x_0, 1)$, $t > 0$.

Лемма 1. Пусть $p(t), p'(t), v(t), v'(t) \in L_2[0, \infty)$. Тогда задача (4) имеет решение $u(\cdot, t) \in C^2(x_0, 1) \cap C([x_0, 1])$; $u(x, \cdot) \in W_2^1(0, \infty)$.

Доказательство. Рассмотрим формальное решение задачи (4), которое может быть найдено методом Фурье:

$$u(x, t) = g(x, t) + \int_0^1 \int_0^t G(x, \xi, t - \tau) f(\zeta, \tau) d\zeta d\tau, \quad (5)$$

где

$$g(x,t) = \frac{v(t) - p(t)}{1 - x_0} x + \frac{p(t) - x_0 v(t)}{1 - x_0}, \quad f(x,t) = \frac{v'(t) - p'(t)}{1 - x_0} x + \frac{p'(t) - x_0 v'(t)}{1 - x_0},$$

$$G(x, \zeta, \tau) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\lambda_n^2 \tau} X_n(\zeta) X_n(x)$$

– функция Грина первой краевой задачи; $X_n(x)$ – собственные функции, образующие полную ортонормированную систему в $L_2[x_0, 1]$, $-\lambda_n^2$ – собственные значения соответствующей задачи Штурма–Лиувилля. Рассмотрим следующие функциональные ряды, сходящиеся равномерно на $[x_0, 1]$:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(X_n(x))^2}{\lambda_n^2}; \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(X_n'(x))^2}{\lambda_n^4}$$

(см. [6, с. 500]). Для произвольных $x, \zeta \in [0, 1], t > t_0 > 0$ с учетом неравенства Коши–Буняковского имеем оценки:

$$\left| \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\lambda_n^2 t} X_n(\zeta) X_n(x) \right| \leq \sup_{\lambda_n} \lambda_n^2 e^{-\lambda_n^2 t} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(X_n(x))^2}{\lambda_n^2} \right)^{1/2} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(X_n(\zeta))^2}{\lambda_n^2} \right)^{1/2} \leq \frac{c_0}{t}, \quad (6)$$

$$\left| \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\lambda_n^2 t} X_n(\zeta) X_n'(x) \right| \leq \sup_{\lambda_n} \lambda_n^4 e^{-\lambda_n^2 t} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(X_n'(x))^2}{\lambda_n^4} \right)^{1/2} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(X_n(\zeta))^2}{\lambda_n^2} \right)^{1/2} \leq \frac{c_1}{t^2}, \quad (7)$$

$$\left| \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\lambda_n^2 t} X_n(\zeta) X_n''(x) \right| \leq \sup_{\lambda_n} \lambda_n^4 e^{-\lambda_n^2 t} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(X_n(x))^2}{\lambda_n^2} \right)^{1/2} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(X_n(\zeta))^2}{\lambda_n^4} \right)^{1/2} \leq \frac{c_2}{t^2}, \quad (8)$$

$$\left| \sum_{n=1}^{\infty} \left(e^{-\lambda_n^2 t} \right)' X_n(\zeta) X_n(x) \right| \leq \sup_{\lambda_n} \lambda_n^4 e^{-\lambda_n^2 t} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(X_n(x))^2}{\lambda_n^2} \right)^{1/2} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(X_n(\zeta))^2}{\lambda_n^2} \right)^{1/2} \leq \frac{c_3}{t^2}. \quad (9)$$

Из неравенств (6)–(9) следует, что функция $G(x, \zeta, t)$ имеет непрерывные производные $G_x(x, \zeta, t)$, $G_{xx}(x, \zeta, t)$, $G_t(x, \zeta, t)$ при всех $x, \zeta \in [0, 1], t > t_0 > 0$.

Рассмотрим произвольное число $t > 0$ и зафиксируем t_0 , $0 < t_0 < t$. Очевидно, при $0 \leq \tau \leq t_0$ функции $G(x, \zeta, t - \tau)$, $G_x(x, \zeta, t - \tau)$, $G_{xx}(x, \zeta, t - \tau)$, $G_t(x, \zeta, t - \tau)$ непрерывны. Рассмотрим ряд

$$P(x, \zeta, \tau) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\lambda_n^2 (t - \tau)} |X_n(\zeta) X_n(x)| \quad (10)$$

и ряд, полученный почленным интегрированием (10):

$$\sum_{n=1}^{\infty} \int_{t_0}^t e^{-\lambda_n^2 (t - \tau)} d\tau |X_n(\zeta) X_n(x)| = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1 - e^{-\lambda_n^2 (t - t_0)}}{\lambda_n^2} |X_n(\zeta) X_n(x)|. \quad (11)$$

Из оценки, аналогичной (6), следует сходимость ряда (11) при всех $x, \zeta \in [0, 1]$. По следствию из теоремы Б. Леви [7] ряд (10) сходится почти всюду на отрезке $0 \leq \tau \leq t$ и функция $P(x, \zeta, \tau)$ (а, следовательно, $G(x, \zeta, t - \tau)$) суммируема на отрезке $0 \leq \tau \leq t$.

Используя свойство абсолютной непрерывности интеграла, по заданному числу $\varepsilon > 0$ выберем $t_0 > 0$ такое, что

$$\left| \int_{t_0}^t G(x, \xi, t - \tau) f(\zeta, \tau) d\tau \right| < \varepsilon.$$

Тогда

$$\left| \int_0^t G(x, \xi, t - \tau) f(\zeta, \tau) d\tau \right| < \left| \int_0^{t_0} G(x, \xi, t - \tau) f(\zeta, \tau) d\tau \right| + \varepsilon \leq C \left| \int_0^{t_0} f(\zeta, \tau) d\tau \right| + \varepsilon \leq C \max_{x \in [0, 1]} |g(x, t_0)|.$$

С учетом последнего неравенства из (5) следует оценка

$$|u(x,t)| \leq C \max_{x \in [0,1]} |g(x,t)|.$$

Рассмотрим ряд

$$S(x,t,\tau) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 f_n(t) e^{-\lambda_n^2(t-\tau)} X_n(x), \tag{11}$$

где $f_n(t) = \int_{x_0}^1 f(\xi,t) X_n(\xi) d\xi = \frac{v'(t) - p'(t)}{1-x_0} \int_{x_0}^1 \xi X_n(\xi) d\xi + \frac{p'(t) - x_0 v'(t)}{1-x_0} \int_{x_0}^1 X_n(\xi) d\xi$ – коэффициенты

Фурье функции $f(x,t)$. Воспользуемся следующим утверждением [10, с. 414].

Утверждение 1. Существует такая постоянная C , что для каждого n и в каждой точке $x \in [x_0, 1]$

$$\left| X_n(x) - \sqrt{\frac{2}{1-x_0}} \sin \lambda_n x \right| \leq \frac{C}{n}.$$

Из утверждения 1 следует, что

$$\left| \int_{x_0}^1 X_n(\xi) d\xi \right| \leq \sqrt{\frac{2}{(1-x_0) \lambda_n}} \frac{2}{\lambda_n} + \frac{C(1-x_0)}{n}; \tag{12}$$

$$\left| \int_{x_0}^1 \xi X_n(\xi) d\xi \right| \leq \sqrt{\frac{2}{(1-x_0)}} \left| \int_{x_0}^1 \xi \sin \lambda_n \xi d\xi \right| + \frac{c}{n} \int_{x_0}^1 \xi d\xi \leq \frac{c_1}{\lambda_n} + \frac{c_2}{n}. \tag{13}$$

Так как существует такая константа c , что при каждом n

$$\left| \lambda_n^2 - \frac{\pi^2 n^2}{(1-x_0)^2} \right| \leq c$$

(см. [10, с. 414]), то из оценок (12) и (13) следует существование такой постоянной D , что

$$\left| \int_{x_0}^1 X_n(\xi) d\xi \right| \leq \frac{D}{\lambda_n}, \tag{14}$$

$$\left| \int_{x_0}^1 \xi X_n(\xi) d\xi \right| \leq \frac{D}{\lambda_n}, \tag{15}$$

при всех n . С учетом (14) и (15) из неравенства (11) следует

$$|S(x,t,\tau)| \leq D_1 \frac{|v'(t)| + |p'(t)|}{1-x_0} \left| \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n e^{-\lambda_n^2(t-\tau)} X_n(x) \right| \leq \max_{\lambda} \lambda^{3/2} e^{-\lambda^2(t-\tau)} \left| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{X_n(x)}{\sqrt{\lambda_n}} \right|. \tag{16}$$

Так как в силу утверждения 1 ряд в правой части (16) сходится при каждом $x \in [x_0; 1]$, то оценка (16) принимает вид

$$|S(x,t,\tau)| \leq \frac{r(x)}{\sqrt{t-\tau}}.$$

Следовательно, функция $S(x,t,\tau)$ суммируема на отрезке $\tau \in [0, t]$ при каждом x .

Далее, используя неравенство (5)

$$|u_x(x,t)| \leq C_1 \max_{x \in [0,1]} |g(x,t)|; |u_{xx}(x,t)| \leq C_2 \max_{x \in [0,1]} |g(x,t)|; |u_t(x,t)| \leq C_3 \left(\max_{x \in [0,1]} |g(x,t)| + |g'(x,t)| \right).$$

Из полученных оценок следует, что $u_{xx}(x,t), u_t(x,t) \in L_2(0, \infty)$ при любом $x \in [0, 1]$. Таким образом, функция $u(x,t)$ является решением задачи (4). Из полученных оценок следует также, что к задаче (3) применимо преобразование Фурье на полупрямой $t \in (0, \infty)$.

Применяя к задаче (3) преобразование Фурье, имеем следующую задачу для линейного обыкновенного уравнения второго порядка:

$$U_{xx}(x, \lambda) = i\lambda U(x, \lambda) - a(x)U(x, \lambda); U(x_0, \lambda) = P(\lambda); U_x(x_0, \lambda) = Q(\lambda). \quad (17)$$

Здесь $U(x, \lambda) = Fu = \int_0^{\infty} e^{-i\lambda t} u(x, t) dt$ – образ Фурье функции $u(x, t)$.

Обозначим через $\varphi(x, t)$ решение уравнения (17), удовлетворяющее условиям $\varphi(x_0, t) = 0; u_x(x_0, t) = 1$; $\psi(x, t)$ – решение уравнения (17), удовлетворяющее условиям $\psi(x_0, t) = 1; \psi_x(x_0, t) = 0$.

Теорема 1. Существуют постоянные $C_1, C_2, C_3, C_4, D_1, D_2, D_3, D_4, \tau$ такие, что

$$C_1 \frac{\text{sh} \sqrt{\lambda}(x-x_0)}{\sqrt{\lambda}} \leq |\varphi(x, \lambda)| \leq C_2 \frac{\text{sh} \sqrt{\lambda}(x-x_0)}{\sqrt{\lambda}}; C_3 \text{ch} \sqrt{\lambda}(x-x_0) \leq |\varphi_x(x, \lambda)| \leq C_4 \text{ch} \sqrt{\lambda}(x-x_0);$$

$D_1 \text{ch} \sqrt{\lambda}(x-x_0) \leq |\psi(x, \lambda)| \leq D_2 \text{ch} \sqrt{\lambda}(x-x_0); D_3 \sqrt{\lambda} \text{sh} \sqrt{\lambda}(x-x_0) \leq |\psi_x(x, \lambda)| \leq D_4 \sqrt{\lambda} \text{sh} \sqrt{\lambda}(x-x_0)$ при $\lambda > \tau$.

Доказательство теоремы аналогично проведенному в [2].

Решение задачи (17) имеет вид

$$U(\lambda) = P(\lambda)\psi(1, \lambda) + Q(\lambda)\varphi(1, \lambda), \quad W(\lambda) = P(\lambda)\psi_x(1, \lambda) + Q(\lambda)\varphi_x(1, \lambda).$$

Рассмотрим следующие линейные нормированные пространства: $L_2(0, \infty)$ – пространство функций, суммируемых с квадратом, определенных при $t \in [0, \infty)$ (принимая действительные значения), $X = L_2(0, \infty) \times L_2(0, \infty)$; Φ – пространство функций, допускающих аналитическое продолжение в полуплоскость $\text{Im } z < 0$ и таких, что

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |F(s + i\sigma)|^2 ds < C$$

при всех $\sigma < 0$; $Y = \Phi \times \Phi$. Выполняется следующая теорема (см., напр., [9])

Теорема 2. Класс функций Φ совпадает с классом функций, представимых в виде

$$F(\lambda) = \int_0^{\infty} e^{-i\lambda t} f(t) dt,$$

где интеграл сходится в среднем и $\int_0^{\infty} |f(t)|^2 dt < \infty$.

Рассмотрим равенство Парсеваля

$$\int_0^{\infty} |f(t)|^2 dt = 2\pi \int_{-\infty}^{+\infty} |F(\lambda)|^2 d\lambda$$

(см. [8]). Так как, очевидно, для функции $f(t)$ с действительными значениями выполняется равенство $F(-\lambda) = \overline{F(\lambda)}$, то из равенства Парсеваля следует

$$\int_0^{\infty} |f(t)|^2 dt = 4\pi \int_0^{+\infty} |F(\lambda)|^2 d\lambda.$$

Следовательно, линейный оператор $F_0 : L_2[0, 1] \rightarrow \Phi$, действующий по правилу

$$F_0(\lambda) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-i\lambda t} f(t) dt,$$

является изометрией. Значит, пространства X и Y также изометричны.

Таким образом, задача (3) сводится к задаче вычисления элемента $\begin{pmatrix} V(\lambda) \\ W(\lambda) \end{pmatrix} \in Y$ такого, что

$$\begin{pmatrix} V(\lambda) \\ W(\lambda) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi(1, \lambda) & \varphi(1, \lambda) \\ \psi_x(1, \lambda) & \varphi_x(1, \lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P(\lambda) \\ Q(\lambda) \end{pmatrix} = A \begin{pmatrix} P(\lambda) \\ Q(\lambda) \end{pmatrix}, \quad (18)$$

где $A : Y \rightarrow Y$ – неограниченный линейный оператор.

Метод приближенного решения

Пусть вместо точных исходных данных $p(t), q(t)$ в задаче (3) известны δ -приближения $p_\delta(t), q_\delta(t)$ и уровень погрешности $\delta > 0$ такие, что $\|p - p_\delta\| \leq \delta$; $\|q - q_\delta\| \leq \delta$. Пусть известно также, что при точно заданных начальных данных $p(t), q(t)$ задача (3) имеет решение, принадлежащее классу равномерной регуляризации

$$M_r = \{(v, w) \in X; (v', w') \in X, \|(v', w')\|_X \leq r\}.$$

Используя метрическую эквивалентность задач (3) и (6), построим предварительно приближенное решение задачи (6). Известно, что при заданных начальных условиях P и Q задача (6) имеет решение, принадлежащее классу равномерной регуляризации

$$\tilde{M}_r = \{G \in Y; \lambda G \in Y, \|\lambda G\|_Y \leq r\}.$$

Требуется построить устойчивое приближенное решение задачи (3) и оценить его отклонение от точного решения.

Рассмотрим регуляризованные начальные данные:

$$v_\delta^\varepsilon(t) = v_\delta(t) * \omega_\varepsilon(t) = \int_t^\infty v_\delta(t-\tau) \omega_\varepsilon(\tau) d\tau; \quad w_\delta^\varepsilon(t) = w_\delta(t) * \omega_\varepsilon(t) = \int_t^\infty w_\delta(t-\tau) \omega_\varepsilon(\tau) d\tau,$$

где

$$\omega_\varepsilon(t) = \begin{cases} \frac{\varepsilon}{t^2 + \varepsilon^2}, & t \geq 0, \\ 0, & t < 0. \end{cases}$$

В качестве приближенного решения задачи (3) будем рассматривать элемент

$$z_\delta(t) = \begin{pmatrix} v_\delta(t) \\ w_\delta(\lambda) \end{pmatrix} = A_0 \begin{pmatrix} p_\delta^\varepsilon(t) \\ w_\delta^\varepsilon(\lambda) \end{pmatrix},$$

образ Фурье которого имеет вид

$$\begin{pmatrix} V_\delta^\varepsilon(\lambda) \\ W_\delta^\varepsilon(\lambda) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi(1, \lambda) & \varphi(1, \lambda) \\ \psi_x(1, \lambda) & \varphi_x(1, \lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_\delta^\varepsilon(\lambda) \\ Q_\delta^\varepsilon(\lambda) \end{pmatrix} = A e^{-\lambda \varepsilon} \begin{pmatrix} P_\delta(\lambda) \\ Q_\delta(\lambda) \end{pmatrix}.$$

Таким образом, в качестве приближенного решения задачи (6) рассматривается элемент

$$Z_\delta^\varepsilon(\lambda) = A e^{-\lambda \varepsilon} P_\delta = A^\varepsilon P_\delta. \quad (19)$$

Оценка погрешности метода проекционной регуляризации

Рассмотрим приближенное решение (18) задачи (17). В качестве характеристики точности приближенного решения (18) рассмотрим величину

$$\Delta(\varepsilon, \delta) = \sup \left\{ \|G_\delta^\varepsilon - G\|; Z \in \tilde{M}_r; \|Z - Z_\delta\| \leq \delta \right\}.$$

Воспользуемся очевидной оценкой

$$\Delta(\varepsilon, \delta) \leq \Delta_1(\varepsilon) + \Delta_2(\varepsilon, \delta),$$

где

$$\Delta_1(\varepsilon) = \sup \left\{ \|G^\varepsilon - G\|; G \in \tilde{M}_r \right\}, \quad G^\varepsilon = A_\varepsilon Z, \quad \Delta_2(\varepsilon, \delta) = \sup \left\{ \|G_\delta^\varepsilon - G^\varepsilon\|; \|Z - Z_\delta\| \leq \delta \right\}.$$

Оценим величины $\Delta_1(\varepsilon)$, $\Delta_2(\varepsilon, \delta)$.

Для величины $\Delta_2(\varepsilon, \delta)$ имеем очевидную оценку $\Delta_2(\varepsilon, \delta) \leq \delta \|A_\varepsilon\|$, где

$$\|A_\varepsilon\| = \max \{ \sqrt{\lambda} : \lambda \in \text{sp}(B_\varepsilon), \lambda \geq 0 \},$$

где

$$B = \begin{pmatrix} \psi(1, \lambda) & \varphi(1, \lambda) \\ \psi_x(1, \lambda) & \varphi_x(1, \lambda) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\psi}(1, \lambda) & \bar{\varphi}_x(1, \lambda) \\ \bar{\varphi}(1, \lambda) & \bar{\psi}_x(1, \lambda) \end{pmatrix} e^{-2\varepsilon \lambda}.$$

Далее,

$$\|A_\varepsilon\| \leq \|B_1\| + \|B_2\|,$$

где

$$B_1 = \begin{pmatrix} \psi(1, \lambda) & \varphi(1, \lambda) \\ 0 & 0 \end{pmatrix} e^{-\varepsilon\lambda}, \quad B_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \psi_x(1, \lambda) & \varphi_x(1, \lambda) \end{pmatrix} e^{-\varepsilon\lambda}.$$

Зафиксируем $\lambda_0 \geq 0$. Рассмотрим матрицу

$$C_1(\lambda_0) = \begin{pmatrix} |\psi(1, \lambda_0)|^2 & \bar{\varphi}(1, \lambda_0)\psi(1, \lambda_0) \\ \varphi(1, \lambda_0)\bar{\psi}(1, \lambda_0) & |\varphi(1, \lambda_0)|^2 \end{pmatrix} e^{-2\varepsilon\lambda_0}.$$

Максимальное собственное значение матрицы C_1 имеет вид

$$y = (|\varphi|^2(1, \lambda) + |\psi|^2(1, \lambda))e^{-\varepsilon\lambda}.$$

Следовательно,

$$\|B_1\| \leq \sup_{\lambda_0 \leq \alpha} \sqrt{|\varphi|^2(1, \lambda) + |\psi|^2(1, \lambda)} e^{-\varepsilon\lambda}.$$

Из последнего неравенства и теоремы 1 следует существование постоянной β_1 такой, что

$$\|B_1\| \leq \beta_1 e^{\frac{1}{2\varepsilon}}.$$

Аналогично, максимальное собственное значение матрицы

$$C_2(\lambda_0) = \begin{pmatrix} |\psi_x(1, \lambda_0)|^2 & \bar{\varphi}_x(1, \lambda_0)\psi_x(1, \lambda_0) \\ \varphi_x(1, \lambda_0)\bar{\psi}_x(1, \lambda_0) & |\varphi_x(1, \lambda_0)|^2 \end{pmatrix} e^{-2\varepsilon\lambda_0}$$

имеет вид

$$y = (|\varphi_x(1, \lambda)|^2 + |\psi_x(1, \lambda)|^2) e^{-2\varepsilon\lambda}.$$

Следовательно,

$$\|B_2\| \leq \sup_{\lambda_0 \leq \alpha} \sqrt{|\varphi_x(1, \lambda)|^2 + |\psi_x(1, \lambda)|^2} e^{-\varepsilon\lambda}.$$

Из последнего неравенства и теоремы 1 следует существование постоянной β_2 такой, что

$$\|B_2\| \leq \beta_2 e^{\frac{1}{2\varepsilon}}.$$

Из неравенств (19) и (20) следует существование постоянной $\beta > 0$ такой, что

$$\Delta_2(\varepsilon, \delta) \leq \beta \delta e^{\frac{1}{2\varepsilon}}. \quad (20)$$

Оценка для величины $\Delta_1(\varepsilon)$ имеет вид

$$\Delta_1(\varepsilon) \leq \sup \left\{ \|(A_\varepsilon - A)A^{-1}G\| : G \in M_r \right\} \leq r \sup_{\lambda \geq 0} \frac{1 - e^{-\varepsilon\lambda}}{\lambda} \leq r\varepsilon. \quad (21)$$

Замечание. Оценивая снизу величины $\Delta_1(\varepsilon)$ и $\Delta_2(\varepsilon, \delta)$, можно убедиться, что оценки (20) и (21) являются точными по порядку.

Выбирая зависимость $\varepsilon = \varepsilon(\delta)$ из условия

$$\delta e^{\frac{1}{2\varepsilon}} = r\varepsilon$$

(квазиоптимальный выбор параметра регуляризации [4]), получаем, что оценка погрешности приближенного решения (18) на множестве \tilde{M}_r имеет вид

$$\Delta(\varepsilon(\delta), \delta) \leq \frac{C_5}{\ln(1/\delta)}. \quad (22)$$

Из замечания следует, что оценка (22) является точной по порядку.

В силу изометричности преобразования Фурье из оценки (21) с учетом оценки погрешности приближенного решения задачи (17) следует

теорема 2. При сформулированных выше условиях существуют постоянные $\delta_0; C_6; C_7$ такие, что для любого $\delta \in (0, \delta_0)$ справедливы оценки погрешности метода проекционной регуляризации на множестве M_r :

$$\frac{C_7}{\ln(1/\delta)} \leq \Delta(\varepsilon(\delta), \delta) \leq \frac{C_6}{\ln(1/\delta)}.$$

Апостериорный выбор параметра регуляризации

Для выбора параметра регуляризации на практике может быть использована следующая схема, не использующая явно априорную информацию о точном решении поставленной обратной задачи (ср. [7]).

Пусть параметр регуляризации выбирается из конечного множества

$$\Lambda_N = \{\varepsilon_i : 0 < \varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \dots < \varepsilon_N\}.$$

Обозначим через $G_{\varepsilon_i}^\delta = R_{\varepsilon_i} Z_\delta$ соответствующие приближенные решения. Пусть G – точное решение задачи (17), $G \in \tilde{M}_r$. Обозначим через ε_{opt} квазиоптимальное значение параметра регуляризации, полученное по схеме М.М. Лаврентьева. Обозначим через ε^* оптимальное значение параметра регуляризации, выбираемое из множества Λ_N , т.е.

$$\varepsilon^* = \max \{\varepsilon_i : \varepsilon_i \in M(\Lambda_N)\},$$

где

$$M(\Lambda_N) = \left\{ \varepsilon_i \in \Lambda_N : r\varepsilon_i \leq \delta e^{\frac{1}{2\varepsilon_i}} \right\}.$$

Пусть $M(\Lambda_N) \neq \emptyset$; $\Lambda_N \setminus M(\Lambda_N) \neq \emptyset$.

Наряду с $M(\Lambda_N)$ рассмотрим множество

$$M^+(\Lambda_N) = \left\{ \varepsilon_i \in \Lambda_N : \|G_{\varepsilon_i}^\delta - G_{\varepsilon_j}^\delta\| \leq 4\delta e^{\frac{1}{2\varepsilon_j}} \quad (j = 0, 1, \dots, i) \right\}.$$

Лемма 2. $M(\Lambda_N) \subseteq M^+(\Lambda_N)$.

Доказательство. Рассмотрим значения параметра регуляризации $\varepsilon_i, \varepsilon_j \in \Lambda_N; \varepsilon_i \in M(\Lambda_N), j < i$. Имеем неравенство

$$\|G_{\varepsilon_i}^\delta - G_{\varepsilon_j}^\delta\| \leq \|G_{\varepsilon_i}^\delta - G\| + \|G - G_{\varepsilon_j}^\delta\| + \|G_{\varepsilon_i}^\delta - G_{\varepsilon_j}^\delta\| \leq \delta e^{\frac{1}{2\varepsilon_i}} + \delta e^{\frac{1}{2\varepsilon_j}} + r\varepsilon_i + r\varepsilon_j \leq 4\delta e^{\frac{1}{2\varepsilon_j}}.$$

Следовательно, $\varepsilon_i \in M^+(\Lambda_N)$.

Обоснование одного из правил апостериорного выбора параметра регуляризации дает следующая теорема.

Теорема 3. Пусть параметр регуляризации выбран из условия

$$\varepsilon^+ = \max \{\varepsilon_i : \varepsilon_i \in M^+(\Lambda_N)\}.$$

Тогда

$$\Delta(\varepsilon^+(\delta), \delta) = \sup \left\{ \|G_\delta^\varepsilon - G\| : G \in \tilde{M}_r; \|Z - Z_\delta\| \leq \delta \right\} \leq \frac{6C_5}{\ln(1/\delta)}.$$

Доказательство. Из определения $\varepsilon^* = \varepsilon_l$ следует, что для ε_{l+1} выполняется неравенство

$$\frac{r\varepsilon_{l+1}}{1} \geq \delta = \frac{r\varepsilon_{opt}}{1} e^{2\varepsilon_{opt}}.$$

Следовательно, в силу монотонности функции $s(x) = \frac{rx}{1} e^{2x}$ на промежутке $x \in (0, \infty)$, $\varepsilon_{l+1} \geq \varepsilon_{opt}$ и

$$\delta e^{\frac{1}{2\varepsilon_{i+1}}} \leq \delta e^{\frac{1}{2\varepsilon_{opt}}}$$

В силу леммы 2, так как $M(\Lambda_N) \subseteq M^+(\Lambda_N)$,

$$\varepsilon^* = \varepsilon_l = \max \{ \varepsilon_i : \varepsilon_i \in M(\Lambda_N) \} \leq \varepsilon^+ = \max \{ \varepsilon_i : \varepsilon_i \in M^+(\Lambda_N) \}.$$

Из определения $M^+(\Lambda_N)$ следует

$$\begin{aligned} \Delta(\varepsilon^+(\delta), \delta) &= \sup \left\{ \left\| G_\delta^{\varepsilon^+} - G \right\| : G \in \tilde{M}_r; \|Z - Z_\delta\| \leq \delta \right\} \leq \\ &\leq \sup \left\{ \left\| G_\delta^{\varepsilon^+} - G_\delta^{\varepsilon^*} \right\| : Z \in \tilde{M}_r; \|Z - Z_\delta\| \leq \delta \right\} + \sup \left\{ \left\| G_\delta^{\varepsilon^*} - G \right\| : G \in \tilde{M}_r; \|Z - Z_\delta\| \leq \delta \right\} \leq \\ &\leq 4\delta e^{\frac{1}{2\varepsilon_l}} + \delta e^{\frac{1}{2\varepsilon^*}} + r\varepsilon^* \leq 6\Delta(\varepsilon_{opt}(\delta), \delta) \leq \frac{6C_5}{\ln(1/\delta)}. \end{aligned}$$

Теорема доказана.

Литература

1. Лаврентьев, М.М. О некоторых некорректных задачах математической физики / М.М. Лаврентьев. – Новосибирск: Наука, 1962. – 92 с.
2. 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.
3. Ильин, А.М. Уравнения математической физики / А.М. Ильин. – Челябинск: Изд-во ЧелГУ, 2005. – 171 с.
4. Иванов, В.К. Дифференциально-операторные уравнения и некорректные задачи / В.К. Иванов, И.В. Мельникова, А.И. Филингов. – М.: Наука, 1995. – 175 с.
5. Танана, В.П. Об одном подходе к приближению разрывного решения некорректно поставленной задачи / В.П. Танана, Е.В. Табаринцева // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2005. – Т. 8, № 1(21). – С. 129–142.
6. Владимиров, В.С. Уравнения математической физики / В.С. Владимиров. – М.: Наука, 1971. – 512 с.
7. Pereverzev, S. On the adaptive selection of the parameter in regularization of ill-posed problems / S. Pereverzev, E. Schock // SIAM J. Numer. Anal. – 2005. – V. 43, № 5. – P. 2060–2076.
8. Колмогоров, А.Н. Элементы теории функций и функционального анализа / А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин. – М.: Наука, 1989. – 496 с.
9. Виленкин, Н.Я. Специальные функции и теория представлений групп / Н.Я. Виленкин. М.: Наука, 1965. – 588 с.
10. Дьедоне, Ж. Основы современного анализа / Ж. Дьедонне. – М.: Мир, 1964. – 430 с.

Поступила в редакцию 20 апреля 2010 г.

ABOUT SOLVING ONE BOUNDARY INVERSE PROBLEM FOR PARABOLIC EQUATION

The problem of restoration of boundary conditions of the third genre using additional information about decision of the parabolic equation is considered. The method of the approached solution of the set problem with a choice of parameter of regularization using M.M. Lavrenteva's scheme [1] and one of schemes of a posteriori choice of regularization parameter is considered. The exact in order estimation of error of the constructed approximate answer based on one of the classes of the uniform regularization is received.

Keywords: inverse problem, approximate answer method, error estimation.

Tabarintseva Elena Vladimirovna is Cand.Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Functional Analysis Department, South Ural State University.

Табаринцева Елена Владимировна – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра функционального анализа, механико-математический факультет, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: eltab@rambler.ru

УСЛОВИЯ ВЫЖИВАНИЯ ПОПУЛЯЦИИ В МОДЕЛЯХ НИКОЛСОНА С ЗАПАЗДЫВАНИЕМ

А.Д. Хохлов

Рассматривается модель Николсона с запаздыванием, описывающая динамику численности популяции. Изучаются свойства решений этой модели, доказывается равномерная отделимость решений от нуля и находится нижняя оценка решений как функция параметров модели. Исследуется двухзональная модель, построенная на основе модели Николсона. Устанавливаются нижние оценки решений при различных сочетаниях параметров.

Ключевые слова: динамика численности популяции, отделимость от нуля, модель Николсона.

Введение

Актуальной задачей математического моделирования является задача описания динамики численности популяции. Одним из свойств решений моделей, описывающих динамику численности популяции, является отделимость решений от нуля при определенных сочетаниях параметров модели, что обеспечивает выживание популяции. Знание функциональной связи между нижними оценками решений и параметрами моделей позволяет делать выводы о развитии популяции в будущем, не находя решений в явном виде.

Модель Николсона

Модель Николсона [1] динамики численности одной популяции описывается дифференциальным уравнением с запаздыванием $\tau > 0$:

$$\frac{dx(t)}{dt} = P \cdot x(t-\tau) \cdot e^{-\alpha \cdot x(t-\tau)} - \delta \cdot x(t), \quad t \geq 0, \quad (1)$$

$$x(s) = \varphi(s) \text{ для } s \in [-\tau, 0], \quad (2)$$

$$\varphi \in C([-\tau, 0], R^+) \text{ и } \varphi(0) > 0,$$

где $x(t)$ – численность популяции в момент времени t ; $P > 0$ – коэффициент рождаемости; $\tau > 0$ – время созревания особи; $\alpha > 0$ – коэффициент системы; $\delta > 0$ – коэффициент смертности; $\varphi(s)$ – начальная функция.

При исследовании решений моделей, описывающих численность популяции, важной задачей является определение условий равномерной отделимости решений от нуля, что обеспечивает сохранение популяции [2]. При различных сочетаниях параметров уравнения P, δ найдены показатели живучести популяции в виде функции $\eta(P, \delta)$.

Теорема 1. При $\delta < P \leq \delta e$ для любого решения $x(t)$ задачи (1)–(2) верно равенство

$$\liminf_{t \rightarrow \infty} x(t) = \eta = \frac{1}{\alpha} \ln \left(\frac{P}{\delta} \right). \quad (3)$$

При $P > \delta e$ для любого решения $x(t)$ модели (1)–(2) верно неравенство

$$\liminf_{x \rightarrow \infty} x(t) \geq \eta = \frac{P^2}{\alpha \delta^2 e} e^{-\frac{P}{\delta e}}. \quad (4)$$

Таким образом, условием выживания популяции в данной модели является выполнение неравенства $P > \delta$.

На рис. 1 представлено устойчивое решение модели Николсона с параметрами, соответствующими первой части теоремы 1 (сплошная линия), а также найденный теоретически показатель живучести

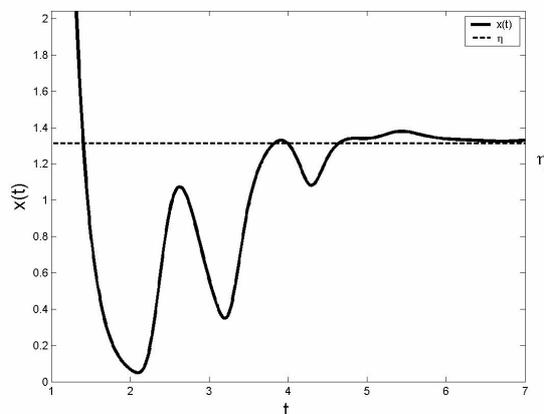


Рис. 1. Отделимость от нуля устойчивого решения модели с параметрами из первой части теоремы 1

сти η (пунктирная линия). С течением времени решение стремится к показателю η .

На рис. 2 представлено неустойчивое решение модели Николсона с параметрами, соответствующими второй части теоремы 1. С течением времени решение становится больше найденного теоретически показателя живучести η .

Двухзонная модель

Двухзонная модель, построенная на основе модели Николсона, описывает динамику численности рыбной популяции, находящейся в двух относительно изолированных зонах, причём рыбалка разрешена только во второй зоне. Рыба может мигрировать из одной зоны в другую. Данная модель описывается системой двух уравнений с запаздыванием [2]. Эта модель принадлежит классу нелинейных уравнений с запаздыванием и выглядит следующим образом:

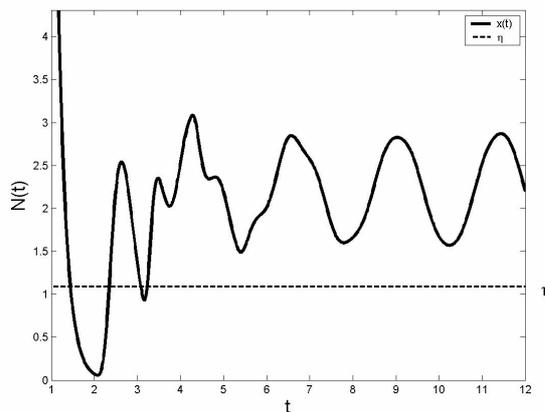


Рис. 2. Отделённость от нуля неустойчивого решения модели с параметрами из второй части теоремы 1

$$\begin{cases} \frac{dx_1(t)}{dt} = -m_1 \cdot x_1(t) - d_1 \cdot x_1(t) + d_2 \cdot x_2(t) + \gamma_1 \cdot x_1(t-\tau) \cdot e^{-\alpha_1 \cdot x_1(t-\tau)}, \\ \frac{dx_2(t)}{dt} = -m_2 \cdot x_2(t) - d_2 \cdot x_2(t) + d_1 \cdot x_1(t) + \gamma_2 \cdot x_2(t-\tau) \cdot e^{-\alpha_2 \cdot x_2(t-\tau)} - h \cdot x_2(t), \end{cases} \quad (5)$$

$$x_i(s) = \varphi_i(s) \text{ для } s \in [-\tau, 0], i = 1, 2, \quad (6)$$

$$\varphi \in C([-\tau, 0], R^+) \text{ и } \varphi(0) > 0,$$

где $x_1(t), x_2(t)$ – численность популяции в момент времени t ; $m_1 > 0, m_2 > 0$ – коэффициенты смертности; $\gamma_1 > 0, \gamma_2 > 0$ – коэффициенты рождаемости; $\alpha_1 > 0, \alpha_2 > 0$ – репродуктивная сила; $d_1 > 0$ – коэффициент миграции рыбы из зоны 1 в зону 2; $d_2 > 0$ – коэффициент миграции рыбы из зоны 2 в зону 1; $h > 0$ – коэффициент рыбалки в зоне 2; $\tau > 0$ – запаздывание, связанное с воспроизводством популяции.

Будем иметь в виду, что индексы 1 и 2 обозначают зоны 1 и 2 соответственно.

Для сохранения популяции необходимо, чтобы

$$\exists \mu > 0 \quad \liminf_{t \rightarrow \infty} x_i(t) \geq \mu, \quad i = 1, 2. \quad (7)$$

Но для того чтобы судить о выживаемости, необходимо знать показатель живучести μ как функцию от параметров уравнения $\mu(m_1, m_2, \gamma_1, \gamma_2, d_1, d_2, \alpha_1, \alpha_2, h)$.

Для задачи (5)–(6) доказана следующая теорема.

Теорема 2. Для всякой траектории системы (5) с положительными начальными условиями выполняются неравенства:

1) При $m_1 + d_1 < \gamma_1 \leq (m_1 + d_1)e, m_2 + d_2 + h < \gamma_2 \leq (m_2 + d_2 + h)e$

$$\liminf_{t \rightarrow \infty} x_1(t) \geq \mu_1, \quad \liminf_{t \rightarrow \infty} x_2(t) \geq \mu_2. \quad (8)$$

2) При $\gamma_1 > (m_1 + d_1)e, \gamma_2 > (m_2 + d_2 + h)e$

$$\liminf_{t \rightarrow \infty} x_1(t) \geq \mu_3, \quad \liminf_{t \rightarrow \infty} x_2(t) \geq \mu_4. \quad (9)$$

3) При $m_1 + d_1 < \gamma_1 \leq (m_1 + d_1)e, \gamma_2 > (m_2 + d_2 + h)e$

$$\liminf_{t \rightarrow \infty} x_1(t) \geq \mu_1, \quad \liminf_{t \rightarrow \infty} x_2(t) \geq \mu_4. \quad (10)$$

4) При $\gamma_1 > (m_1 + d_1)e, m_2 + d_2 + h < \gamma_2 \leq (m_2 + d_2 + h)e$

$$\liminf_{t \rightarrow \infty} x_1(t) \geq \mu_3, \quad \liminf_{t \rightarrow \infty} x_2(t) \geq \mu_2, \quad (11)$$

где

$$\mu_i = \frac{1}{\alpha_i} \ln \frac{\gamma_i}{m_i + d_i} > 0, \quad i = 1, 2, \quad (12)$$

$$\mu_j = \frac{\gamma_j^2}{\alpha_j (m_j + d_j)^2} e^{-\frac{\gamma_j}{(m_j + d_j)e}} > 0, \quad j = 3, 4.$$

Теорема 2 определяет функциональную связь между коэффициентами живучести популяции в обеих зонах и параметрами системы. Это позволяет, не решая уравнения, а зная только его параметры, определить, выживет популяция в будущем или нет.

На рис. 3 и 4 представлены фазовые траектории решений задачи (5)–(6), параметры которой удовлетворяют условиям теоремы 2.

На рис. 3 изображена траектория устойчивого решения (со следующими параметрами: $m_1 = 0,2$, $m_2 = 0,5$, $\gamma_1 = 3,3$, $\gamma_2 = 3,7$, $d_1 = 1$, $d_2 = 1$, $\alpha_1 = 0,16$, $\alpha_2 = 0,9$, $h = 0,7$), а на рис. 4 (с параметрами: $m_1 = 0,2$, $m_2 = 0,5$, $\gamma_1 = 2,2$, $\gamma_2 = 13,7$, $d_1 = 1$, $d_2 = 1$, $\alpha_1 = 0,16$, $\alpha_2 = 0,9$, $h = 0,7$) траектория неустойчивого решения модели. На графике показаны две прямые, представляющие показатели живучести для первой и второй зон соответственно. В обоих случаях наблюдается отделённость решений от нуля независимо от устойчивости.

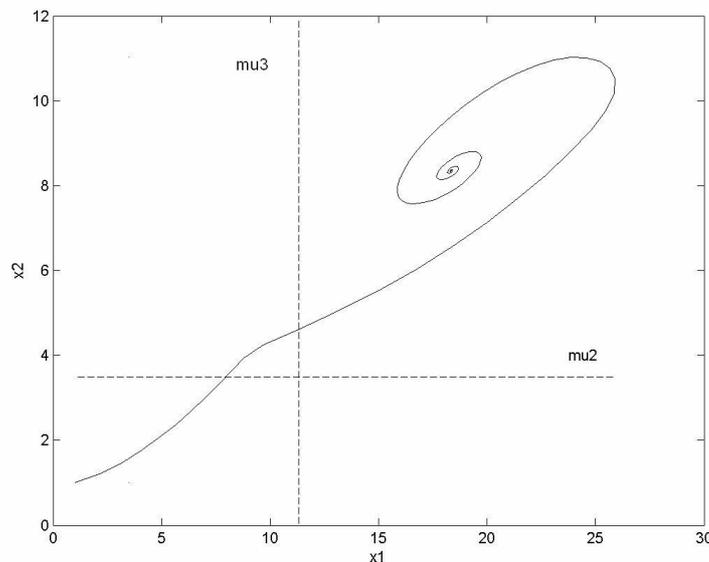


Рис. 3. Отделённость от нуля устойчивого решения модели с параметрами из п. 4 теоремы 2

Вывод

Для двух моделей представлены условия равномерной отделённости решений от нуля, а также найдены показатели живучести как функции от параметров моделей. На приведённых графиках можно проследить поведение решений моделей относительно найденных показателей живучести. Полученные результаты имеют прикладное значение и могут быть применены для анализа численности популяции.

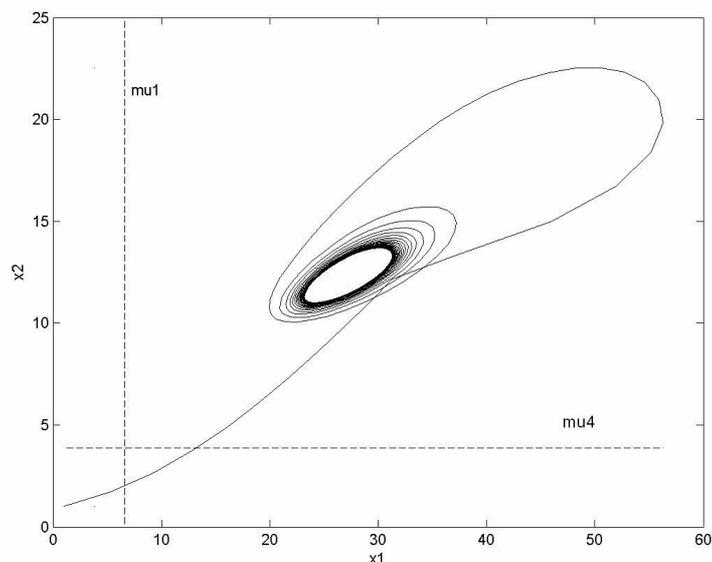


Рис. 4. Отделённость от нуля неустойчивого решения модели с параметрами из п. 3 теоремы 2

Литература

1. Nicholson, A. J. An outline of the dynamics of animal populations / A. J. Nicholson // Austral. J. Zoo, 1954. – № 2. – P. 9–65.
2. Hale, J. K. Persistence in infinite dimensional systems / J. K Hale, P. Waltman // SIAM J. Math. Anal. – 1989. – № 20. – P. 388–395.
3. Idels, L. Stability criteria for a nonlinear nonautonomous system with delays / L. Idels, M. Kipnis // Applied Mathematical Modelling, 2009. – V. 33. – Issue 5. – P. 2293–2297.
4. Беллман, Р. Дифференциально-разностные уравнения / Р. Беллман, К. Кук. – М.: Мир, 1967. – 548 с.

Поступила в редакцию 28 июня 2010 г.

CONDITIONS OF THE SURVIVAL OF POPULATION IN NICHOLSON'S MODELS WITH DELAY

The Nicholson's model with delay describing dynamics of the magnitude of population is considered. Properties of the model solutions are analyzed, equal apartness of solutions from zero is proved and a lower estimation of decisions as function of the model parameters is found. A two-band model constructed on the basis of Nicholson's model is analyzed. The lower estimations of solutions with various parameters combinations are found.

Keywords: dynamics of the magnitude of population, apartness from zero, Nicholson's model.

Khokhlov Arthur is Post-graduate Student, Mathematical Analysis Department, South Ural State University.

Хохлов Артур – аспирант, кафедра математического анализа, Южно-Уральский государственный университет.

КОНУС УСТОЙЧИВОСТИ ДЛЯ ЛИНЕЙНОГО МАТРИЧНОГО ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ С ЗАПАЗДЫВАНИЕМ

Т.Н. Хохлова

Построена некоторая поверхность в трехмерном пространстве, называемая конусом устойчивости. Доказано необходимое и достаточное условие асимптотической устойчивости матричного уравнения $\dot{x}(t) + Ax(t) + Bx(t - \tau) = 0$ для матриц произвольного порядка, которое связано с тем, находятся ли вспомогательные точки, зависящие только от собственных чисел матриц A и B и величины запаздывания, внутри конуса устойчивости. От матриц A, B требуется совместная триангулируемость.

Ключевые слова: дифференциальные уравнения с запаздыванием, асимптотическая устойчивость, конус устойчивости.

Введение

Рассматривается задача об асимптотической устойчивости уравнения

$$\dot{x}(t) + Ax(t) + Bx(t - \tau) = 0, \quad t \geq 0 \quad (1)$$

с коммутирующими матрицами A и B и запаздыванием $\tau > 0$.

Это уравнение моделирует динамику нейронных сетей Хопфилда [1]. Матрица A описывает собственную реакцию нейрона на внешнее воздействие, а матрица B характеризует реакцию нейрона, связанную с его взаимодействием с соседними нейронами.

В [1–7] получены некоторые достаточные условия устойчивости уравнения (1). В самой ранней публикации З. Рехлицкого [8] (1956 г.) указаны овалы устойчивости для (1) при $A = 0$, в одной из последних публикаций [9] (2009 г.) исследуется задача устойчивости (1) с 2×2 матрицами A, B специального вида.

Мы требуем одновременной приводимости матриц A и B к треугольному виду. Как известно [10], это возможно для коммутирующих A и B .

Уравнение (1) считаем устойчивым, если его нулевое решение является устойчивым. Рассмотрим вначале скалярный аналог уравнения (1), в котором $\tau = 1$:

$$\dot{x}(t) + ax(t) + bx(t - 1) = 0. \quad (2)$$

Пусть в (2) a – действительное, b – комплексное число. Следующий результат известен (см., например, [3]).

Теорема 1. Уравнение (2) асимптотически устойчиво тогда и только тогда, когда $a > -1$ и на плоскости (u_1, u_2) точка $(\operatorname{Re} b, \operatorname{Im} b)$ находится внутри овала с границей:

$$\begin{cases} u_1 = -a \cos w + w \sin w, \\ u_2 = -a \sin w - w \cos w, \\ -w_1 < w \leq w_1, \end{cases} \quad (3)$$

где w_1 есть наименьший положительный корень уравнения $a = -w / \operatorname{tg} w$.

Если $a > -1$ и точка $(\operatorname{Re} b, \operatorname{Im} b)$ находится на границе овала (3), то уравнение (2) устойчиво (не асимптотически).

На основе теоремы 1 мы даем критерий устойчивости для матричного уравнения (1), в котором матрицы A и B приводятся к треугольному виду одним преобразованием.

Определение 1. Конусом устойчивости для уравнения (2) назовем поверхность в трехмерном пространстве (u_1, u_2, u_3) , сечение которой на уровне $u_3 = a$ есть овал устойчивости (3).

Теорема 2. Пусть $A, B, S \in \mathbb{R}^{m \times m}$ и $S^{-1}AS = A_T$ и $S^{-1}BS = B_T$, где A_T и B_T – нижние треугольные матрицы с элементами соответственно $\lambda_{js}, \mu_{js}, 1 \leq j, s \leq m$.

Построим систему точек $M_j = (u_{1j}, u_{2j}, u_{3j}), 1 \leq j \leq m$:

$$\begin{aligned} u_{1j} &= \tau |\mu_{jj}| \cos(\arg \mu_{jj} + \tau \operatorname{Im} \lambda_{jj}), \\ u_{2j} &= \tau |\mu_{jj}| \sin(\arg \mu_{jj} + \tau \operatorname{Im} \lambda_{jj}), \\ u_{3j} &= \tau \operatorname{Re} \lambda_{jj}. \end{aligned} \quad (4)$$

Уравнение (1) асимптотически устойчиво тогда и только тогда, когда все точки M_j , $1 \leq j \leq m$ находятся внутри конуса устойчивости.

Если хотя бы одна точка M_j лежит вне конуса устойчивости, то уравнение (1) неустойчиво.

Доказательство. Умножим (1) на S^{-1} слева. Изменим масштаб времени, положив $t = \theta\tau$. Сделаем замену $x(t) = Sy(\theta)$. Получим

$$\dot{y}(\theta) + \tau A_T y(\theta) + \tau B_T y(\theta - 1) = 0. \quad (5)$$

Возвратим имя t переменной θ , положим $y = (y_1, \dots, y_m)^T$ и выпишем (5) как треугольную систему скалярных уравнений $1 \leq j \leq m$:

$$\dot{y}_j + \tau \lambda_{jj} y_j + \tau \mu_{jj} y_j(t-1) = -\tau \sum_{k < j} \lambda_{jk} y_k + \mu_{jk} y_k(t-1). \quad (6)$$

В (6) сделаем замену $y_j = \exp(-i \operatorname{Im} \lambda_{jj} t) z_j$ и умножим (6) на $\exp(-i \operatorname{Im} \lambda_{jj} t)$. Получим треугольную систему с действительными коэффициентами при z_j ($1 \leq j \leq m$):

$$\dot{z}_j + \tau \operatorname{Re} \lambda_{jj} z_j + \tau \mu_{jj} \exp(i\tau \operatorname{Im} \lambda_{jj}) z_j(t-1) = \sum_{k < j} v_{jk} z_k + \eta_{jk} z_k(t-1), \quad (7)$$

где v_{jk}, η_{jk} – некоторые постоянные.

Наряду с (7) рассмотрим диагональную систему

$$\dot{z}_j + \tau \operatorname{Re} \lambda_{jj} z_j + \tau \mu_{jj} \exp(i\tau \operatorname{Im} \lambda_{jj}) z_j(t-1) = 0. \quad (8)$$

Пусть все точки $M_j = (u_{1j}, u_{2j}, u_{3j})$, $1 \leq j \leq m$, определенные равенством (4), лежат внутри конуса устойчивости. В сечении конуса плоскостью $u_3 = u_{3j} \in \mathbb{R}$ получим овал (3)

$$\begin{cases} u_1 = -u_{3j} \cos w + w \sin w, \\ u_2 = u_{3j} \sin w + w \cos w, \quad -w_1 \leq w \leq w_1, \end{cases} \quad (9)$$

где $w_1 \in (0, \pi)$ есть корень уравнения $u_{3j} = -w/\operatorname{tg} w$. Точка $M_{*j} = (u_{1j}, u_{2j}) \in \mathbb{R}^2$ лежит внутри этого овала.

Ввиду этого, как хорошо известно (см. [3], [5, Appendix B]), система уравнений (8) асимптотически устойчива.

Перейдем к системе (7). Первое из уравнений (7) совпадает с первым уравнением системы (8), и, следовательно, асимптотически устойчиво, а поэтому все его решения экспоненциально убывают. Во всех остальных уравнениях системы (7) мы последовательно видим асимптотически устойчивые левые части и экспоненциально убывающие правые части. Поэтому все их решения экспоненциально убывают [11]. Получаем, что система (7), а, следовательно, и (1) асимптотически устойчивы.

Пусть точка $M_j = (u_{1j}, u_{2j}, u_{3j})$, определенная равенством (4), лежит на поверхности конуса устойчивости или вне его. Не теряя общности, можем считать, что $j = 1$. В сечении конуса плоскостью $u_3 = u_{3j} \in \mathbb{R}$ получим овал (3). Если точка $M_{*1} = (u_{11}, u_{21})$ лежит на границе овала, то первое уравнение системы (7) не является асимптотически устойчивым, поскольку его характеристическое уравнение в этом случае имеет чисто мнимые корни. Если M_{*1} лежит вне овала, то уравнение (7) при $j = 1$ вообще неустойчиво (см. [3], [5, Appendix B]). Но система (7) (асимптотически) устойчива тогда и только тогда, когда (асимптотически) устойчива система (1). Теорема 2 доказана.

Рассмотрим примеры применения теоремы.

Пример 1. Положим в (1)

$$A = \begin{pmatrix} 0,9 & 6,5 \\ -4,8 & 0,9 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1,39 & 0,65 \\ -0,48 & 1,39 \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Поскольку $B = 0,1A + 1,3I$, матрицы A, B коммутируют и, следовательно, могут быть совместно приведены к диагональной форме [10]. Собственные числа матриц A, B суть соответственно:

$$\lambda_{1,2,2} = 0,9000 \pm 5,5857i, \quad \mu_{1,2,2} = 1,3900 \pm 0,5586i. \quad (11)$$

Вследствие симметрии изучим расположение конической винтовой линии $M_j = (u_{1j}, u_{2j}, u_{3j})$ относительно конуса устойчивости только при $j=1$ (см. рис. 1).

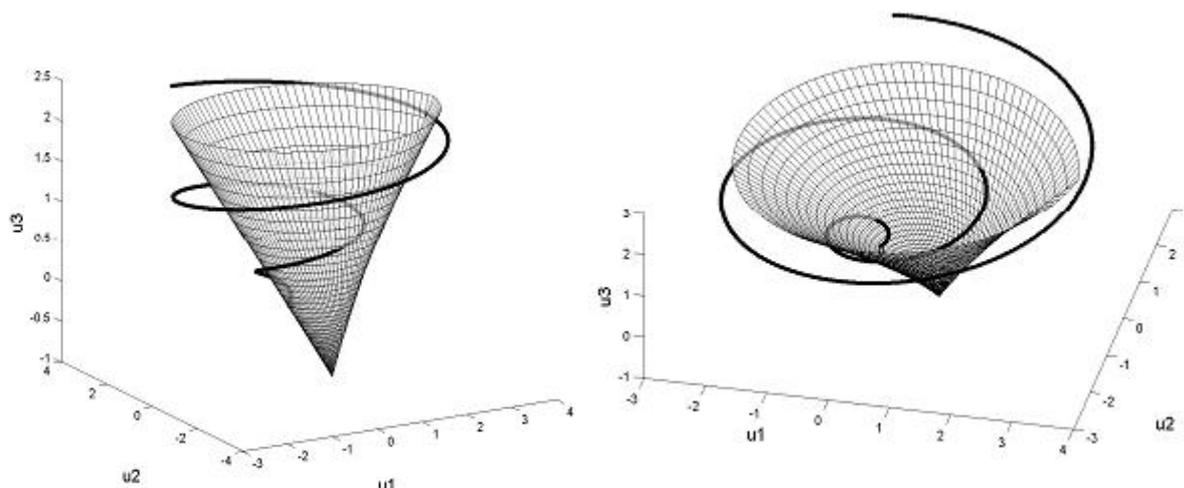


Рис. 1. Конус устойчивости и кривая (4), (11) в двух проекциях

Кривая (4), (7) дважды выходит из конуса устойчивости при значениях τ , равных $\tau_1 \approx 0,2715$, $\tau_3 \approx 1,1965$ и входит в конус при значении τ , равном $\tau_2 \approx 0,8392$. Поэтому уравнение (1) с матрицами (10) асимптотически устойчиво тогда и только тогда, когда

$$\tau \in (0, \tau_1) \cup (\tau_2, \tau_3).$$

Пример 2. Пусть дано уравнение

$$\dot{x}(t) + Ax(t) + Bx(t - \tau) = 0,$$

где

$$A = \begin{pmatrix} -0,1 & -0,01 & 0,03 & 2 \\ -0,03 & 0,1 & 0,5 & -0,3 \\ -1 & 5 & 0,04 & -2 \\ -0,3 & 0,02 & -0,1 & 0,01 \end{pmatrix}, \quad (12)$$

$$B = 0,3E - 0,1A + 1,5A^2.$$

Требуется определить, при каких значениях τ это уравнение устойчиво, а при каких неустойчиво.

Очевидно, матрицы A, B коммутируют. Собственные числа матриц A, B имеют вид:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= -1,4943, & \mu_1 &= 3,7989, \\ \lambda_{2,3} &= -0,0988 \pm 0,7539i, & \mu_{2,3} &= -0,5280 \mp 0,2990i, \\ \lambda_4 &= 1,7420, & \mu_4 &= 4,6777. \end{aligned} \quad (13)$$

Построим точки $M_j = (u_{1j}, u_{2j}, u_{3j})$, $1 \leq j \leq 4$ и конус устойчивости и проследим их взаимное расположение с изменением τ . Четыре системы точек и конус устойчивости изображены на рис. 2.

Для устойчивости необходимо и достаточно, чтобы все точки $M_j = (u_{1j}, u_{2j}, u_{3j})$, $1 \leq j \leq 4$ находились внутри конуса устойчивости. Две системы точек, соответствующие комплексным собственным значениям матрицы A , с изменением τ образуют винтовые линии, выходящие из конуса при $\tau = 0$ и лежащие за его пределами при всех $\tau > 0$.

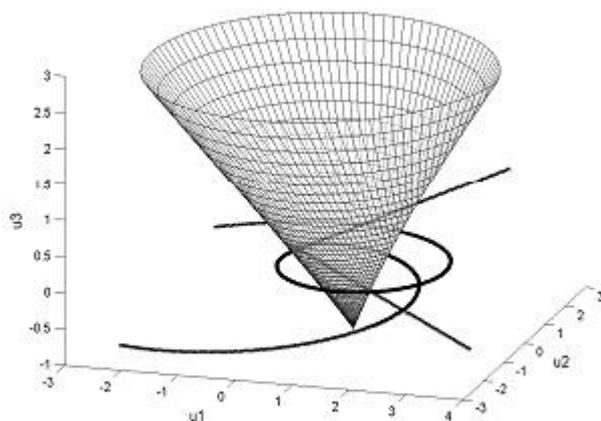


Рис. 2. Конус устойчивости и кривые (4), (13)

Две другие системы точек, соответствующие действительным собственным значениям матрицы A , образуют прямые, каждая из которых один раз пересекает конус устойчивости, а затем находится вне его.

Согласно теореме 2 для асимптотической устойчивости требуется, чтобы внутри конуса находились все точки $M_j = (u_{1j}, u_{2j}, u_{3j})$, $1 \leq j \leq m$. Поэтому уравнение (1) с матрицами (12) неустойчиво при любом τ .

Литература

1. Gu, K. Stability of time-delay systems / K. Gu, V. Kharitonov, J. Chen. – Springer, 2003. – 376 с.
2. Idels, L. Stability criteria for a nonlinear nonautonomous system with delays / L. Idels, M. Kirpich // Applied Mathematical Modelling. – 2009. – V. 33. – Issue 5. – P. 2293–2297.
3. Кирьянен, А.И. Устойчивость систем с последействием и их приложения / А.И. Кирьянен. – Изд-во СПбУ. – 1994. – 235 с.
4. Кирьянен, А.И. Устойчивость уравнения $\dot{x}(t) = \alpha x(t-h) + \beta x(t)$ с комплексными коэффициентами / А.И. Кирьянен, К.В. Галунова // Уравнения в частных производных, ЛГПИ им. А.И. Герцена, 1989. – С. 65–72.
5. Mori, T. Simple stability criteria for single and composite linear systems with time delay / T. Mori, N. Fukuma, M. Kuwahara // Int. J. Control. – 1981. – V. 34. – P. 1175–1184.
6. Mori T. Stability of $\dot{x}(t) = Ax(t) + Bx(t-\tau)$ / T. Mori, H. Kokame // IEEE Trans. Autom. Control, 1989. – V. 34, № 4. – P. 460–462.
7. Shuenn-Shyang Wang Further results on stability of $\dot{x}(t) = Ax(t) + Bx(t-\tau)$ // Systems & Control Letters. – 1992. – V. 19. – Issue 2. – P. 165–168.
8. Рехлицкий, З.И. Об устойчивости решений некоторых линейных дифференциальных уравнений в банаховом пространстве // Изв. АН СССР. – 1956. – Т. 111. – С. 29–32.
9. Matsunaga, H. Stability Regions for Linear Delay Differential Equations with Four Parameters / H. Matsunaga // International Journal of Qualitative Theory of Differential Equations and Applications, 2009. – V. 3, № 1–2. – P. 99–107.
10. Horn, R. Matrix Theory / R. Horn, C. Johnson // Cambridge Univ. Press. – 1986. – 561 с.
11. Азбелев, Н.В. Устойчивость уравнений с запаздывающим аргументом / Н.В. Азбелев, П.М. Симонов // Изв. вузов. Математика. – 1997. – № 6. – С. 3–16.

Поступила в редакцию 28 июня 2010 г.

**STABILITY CONE FOR THE RETARDED LINEAR MATRIX
DIFFERENTIAL EQUATION**

Some surface in the three-dimensional space, named a stability cone is constructed. The necessary and sufficient condition of asymptotic stability of the matrix equation $\dot{x}(t) + Ax(t) + Bx(t - \tau) = 0$ for random order matrixes which is connected with whether there are the auxiliary points which depend only on A and B matrix eigenvalues and on retardation value in a stability cone is proved. The matrixes A, B are required a joint triangulability.

Keywords: retarded differential equations, asymptotic stability, stability cone.

Hohlova Tatyana is Post-graduate Student, Mathematical Analysis Department, South Ural State University.

Хохлова Татьяна – аспирант, кафедра математического анализа, Южно-Уральский государственный университет.

ПОТЕРЯ УСТОЙЧИВОСТИ ОДНОРОДНОГО СТЕРЖНЯ ПРИ ПРОДОЛЬНОМ УДАРЕ О СТЕРЖЕНЬ, ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИЙ С ЖЕСТКОЙ ПРЕГРАДОЙ

А.А. Битюрин

Осуществляется математическое моделирование продольного упругого центрального удара однородного стержня меньшего поперечного сечения по однородному стержню, взаимодействующему с жесткой преградой, при не удерживающих связях в контактном и ударном сечениях. Моделируется величина критической предупредительной скорости, приводящей к потере устойчивости рассматриваемой стержневой системы.

Ключевые слова: продольный удар, устойчивость, деформация, математическое моделирование, скорость, жесткая преграда, стержень.

Введение

Выполнение многих технологических операций в машиностроении, металлургии, горном деле, строительстве, производстве строительных материалов и прочих многочисленных отраслях связано с ударной обработкой и разрушением различных материалов. Машины как средства, основанные на применении удара, используются для выполнения работ, связанных с возбуждением в обрабатываемом материале значительных по величине усилий, приводящих к разрушению материала или его деформированию (например, машины для штамповки деталей,ковки, разрушения горных пород, бетонных покрытий, погружения свай и т.д.). Эффективность применения таких машин во многом обусловлена тем, что разрушение материала или его деформирование во многих технологических процессах определяется уровнем возникающих напряжений, а не продолжительностью их воздействия. В основе технологических операций с использованием машин ударного действия лежит нанесение продольного удара неоднородного упругого стержня или системы стержней.

Впервые задача о динамической устойчивости упругих стержней при мгновенном продольном действии сжимающей нагрузки, которая в дальнейшем сохраняет своё постоянное значение, была решена М.А. Лаврентьевым и А.Ю. Ишлинским в работе [7]. Позднее проводилось теоретическое исследование потери устойчивости мгновенно сжатого бесконечного упругого стержня методом малых возмущений [11], а также исследование потери устойчивости полубесконечного упругого стержня [5, 8]. В работах [9, 10] Малым В.И. предложен подход для исследования потери устойчивости стержней при больших и малых прогибах на основе асимптотического метода линеаризации на неустановившейся стадии выпучивания при ударе полубесконечного упругого стержня телом большой массы, движущимся с постоянной скоростью.

Выполнение поставленных задач сводилось либо к аналитическому, либо к численному решению линеаризованного дифференциального уравнения четвёртого порядка, а также системы дифференциальных уравнений движения стержня с начальной прогибью. Недостатком такого подхода является очевидная трудность математического решения, сопряженная с громоздкими математическими выкладками, а также удовлетворительная сходимость результатов математического моделирования и экспериментальных данных лишь в узком интервале изменения той или иной характеристики, связанная с накоплением погрешности вычислений в ходе проведения математических операций. Задача о потере устойчивости неоднородных ступенчатых стержней при ударе в перечисленных работах, а также в работах [2, 5, 12, 14] не рассматривалась.

Постановка задачи

Рассматривается математическая модель продольного упругого центрального удара однородного стержня меньшего поперечного сечения, движущегося со скоростью V_0 , по однородно-

му стержню, взаимодействующему с жесткой преградой. Масса первого стержня m_1 , длина l_1 , масса и длина второго соответственно m_2 и l_2 , общая длина обеих стержней $l=l_1+l_2$ (рис. 1). Оба стержня состоят из одного материала.

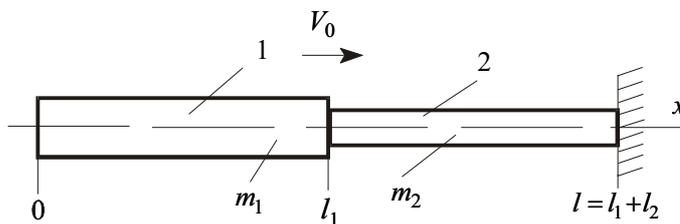


Рис. 1. Схема удара однородных стержней при неударяющих связях

Движение поперечных сечений соударяемых стержней описывается волновыми уравнениями:

$$\frac{\partial^2 u_1(x,t)}{\partial x^2} - \frac{1}{a^2} \frac{\partial^2 u_1(x,t)}{\partial t^2} = 0, \quad 0 \leq x \leq l_1, \quad (1)$$

$$\frac{\partial^2 u_2(x,t)}{\partial x^2} - \frac{1}{a^2} \frac{\partial^2 u_2(x,t)}{\partial t^2} = 0, \quad l_1 \leq x \leq l, \quad (2)$$

где $u_1(x,t), u_2(x,t)$ – продольное перемещение поперечного сечения стержней 1 и 2, x – координата сечения, t – время, a – скорость распространения продольной волны деформации.

Начальные условия определяют состояние стержней перед их соударением:

$$\text{при } t = t_0 = 0 \quad \frac{\partial u_1(x,t_0)}{\partial t} = V_0, \quad \frac{\partial u_1(x,t_0)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u_2(x,t_0)}{\partial t} = 0, \quad \frac{\partial u_2(x,t_0)}{\partial x} = 0. \quad (3)$$

Краевые условия определяют отсутствие силы в сечении $x = 0$ и равенство нулю скорости сечения $x = l$ при взаимодействии стержня 2 с жесткой преградой:

$$\frac{\partial u_1(0,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u_2(l,t)}{\partial t} = 0, \quad (4)$$

а также определяют равенство сил и условия сопряжения стержней в сечениях $x = l_1$ при непосредственном их взаимодействии:

$$EA_1 \frac{\partial u_1(l_1,t)}{\partial x} = EA_2 \frac{\partial u_2(l_1,t)}{\partial x}, \quad \text{если } \frac{\partial u_1(l_1,t)}{\partial x} < 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial u_1(l_1,t)}{\partial t} = \frac{\partial u_2(l_1,t)}{\partial t}, \quad \text{если } \frac{\partial u_1(l_1,t)}{\partial x} < 0, \quad (6)$$

либо отсутствие сил в ударных сечениях стержней, если их взаимодействие отсутствует:

$$\frac{\partial u_1(l_1,t)}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u_2(l_1,t)}{\partial x} = 0, \quad \text{если } u_1(l_1,t) - u_2(l_1,t) \leq 0, \quad (7)$$

где E – модуль упругости первого рода, A_1 и A_2 – площади поперечных сечений соответственно первого и второго стержней, a – скорость распространения продольной волны деформации.

Метод решения

Решение дифференциальных уравнений (1), (2) реализуется методом Даламбера в виде [1]:

$$u_1(x,t) = f_1(at - x) + \varphi_1(at + x), \quad 0 \leq x \leq l_1, \quad (8)$$

$$u_2(x,t) = f_2(at - x) + \varphi_2(at + x), \quad l_1 \leq x \leq l_1 + l_2, \quad (9)$$

$$\varepsilon_1(x,t) = \frac{\partial u_1(x,t)}{\partial x} = -f_1'(at - x) + \varphi_1'(at + x), \quad (10)$$

$$v_1(x,t) = \frac{\partial u_1(x,t)}{\partial t} = a[f_1'(at-x) + \varphi_1'(at+x)], \quad (11)$$

$$\varepsilon_2(x,t) = \frac{\partial u_2(x,t)}{\partial x} = -f_2'(at-x) + \varphi_2'(at+x), \quad (12)$$

$$v_2(x,t) = \frac{\partial u_2(x,t)}{\partial t} = a[f_2'(at-x) + \varphi_2'(at+x)]. \quad (13)$$

Перейдем к относительным величинам, характеризующим прямые и обратные волны $\tilde{f}'(at-x) = f'(at-x)/\frac{V_0}{a}$; $\tilde{\varphi}'(at+x) = \varphi'(at+x)/\frac{V_0}{a}$, деформацию в сечении и его скорость $\tilde{\varepsilon}(x,t) = -\tilde{f}'(at-x) + \tilde{\varphi}'(at+x)$, $\tilde{v}(x,t) = \frac{v(x,t)}{V_0} = \tilde{f}'(at-x) + \tilde{\varphi}'(at+x)$.

Пример 1

Пусть в момент времени $T = t_i$ построена диаграмма относительной продольной деформации $\tilde{\varepsilon}$ для первого однородного участка произвольной многоступенчатой стержневой системы при продольном ударе (рис. 2, а).

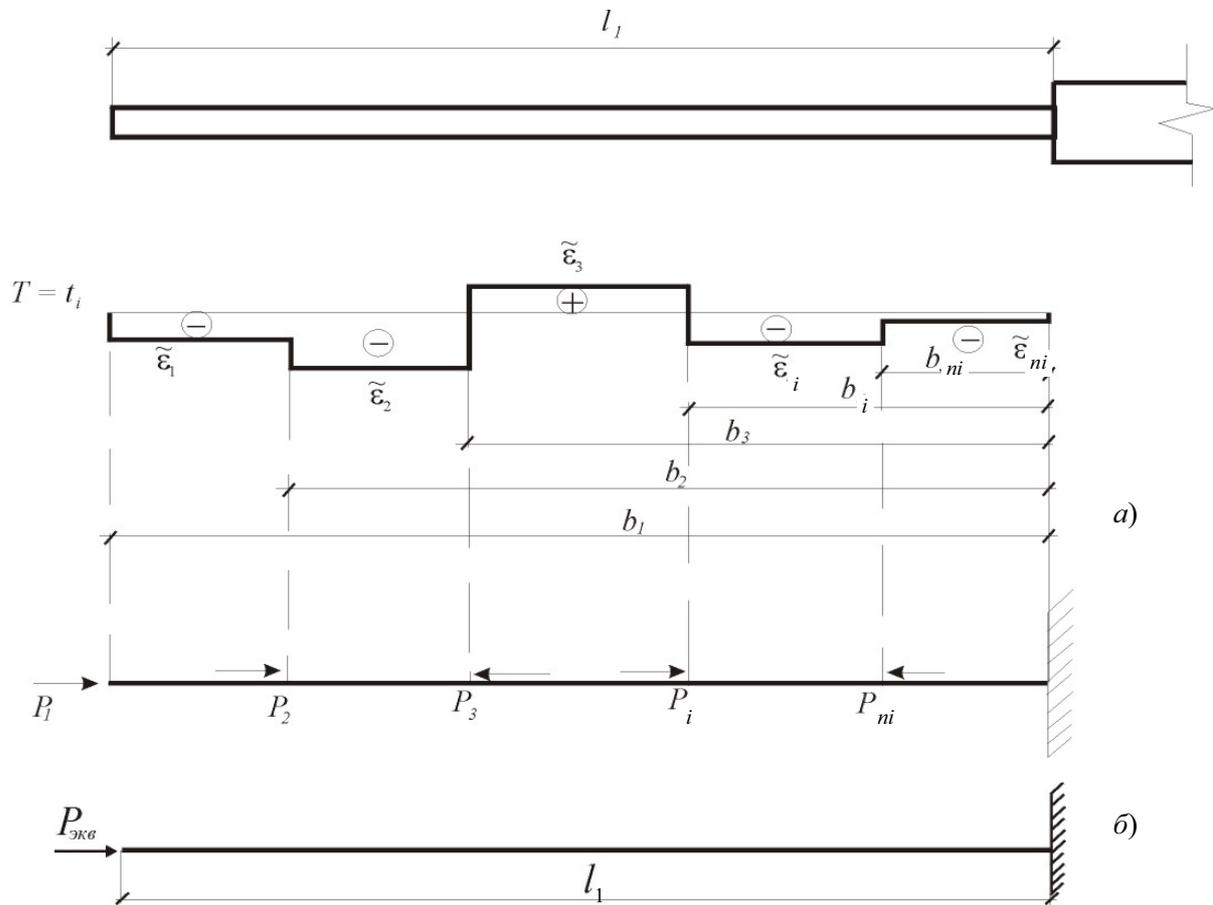


Рис. 2. а) диаграмма относительной продольной деформации для одного из участков произвольной многоступенчатой стержневой системы; б) эквивалентная схема нагружения рассматриваемого однородного участка стержневой системы

Аналогичным путем можно построить диаграмму для любого однородного участка [15]. Величину продольной силы P_i на первом однородном участке, в соответствии с законом Гука [13] и используя данные диаграммы, представим в виде

$$P_i = EA \frac{V_0}{a} (\tilde{\varepsilon}_i - \tilde{\varepsilon}_{i-1}). \quad (14)$$

Для определения эквивалентной продольной нагрузки, приложенной в торце первого однородного участка (рис. 2, б), можно воспользоваться зависимостью (15), представленной в [13]:

$$P_{\text{экв}} = \left[P_1 \left(\frac{b_1}{l_1} \right)^2 + P_2 \left(\frac{b_2}{l_1} \right)^2 + \dots + P_i \left(\frac{b_i}{l_1} \right)^2 + P_n \left(\frac{b_n}{l_1} \right)^2 \right]. \quad (15)$$

В формулах (14) и (15) a – скорость распространения продольной волны деформации в данном материале стержней, E – модуль упругости, A – площадь поперечного сечения рассматриваемого однородного участка, $\tilde{\varepsilon}_i$ – относительная продольная деформация на i -м отрезке рассматриваемого однородного участка многоступенчатого стержня, b_1, b_2, b_i, b_n – координаты приложения продольных сил P_i на этом участке.

Для тонких однородных участков ($l > 15d$, где l и d – соответственно длина и диаметр рассматриваемого участка или стержня) при расчете на устойчивость применима формула Эйлера [6, 13]

$$P_{\text{кр}} = \pi^2 EJ_{\text{min}} / (\mu l)^2, \quad (16)$$

где J_{min} – минимальный момент инерции поперечного сечения относительно главных центральных осей инерции, μ – коэффициент приведения длины, зависящий от схемы закрепления стержня [13], l – длина рассматриваемого однородного участка. В данном случае это будет длина l_1 , поскольку l обозначена общая длина ступенчатого стержня. Если рассматриваемый однородный участок жестко связан со вторым, то коэффициент приведения длины для первого однородного участка μ принимается равным 2 [13]. Аналогичным путем можно рассматривать любой однородный участок произвольной многоступенчатой стержневой системы и в зависимости от его связей с другими участками или с жесткой преградой μ будет принимать значения от 0,7 до 2 [6, 13].

Необходимо отметить, что в данном случае речь идет о динамической задаче, тогда как формула Эйлера применяется в случае статического нагружения. Ударная сила, действующая на стержень в результате волновых преобразований, рассматривается как постоянная статическая нагрузка в течение малого промежутка времени.

Для выполнения условия сохранения устойчивого состояния многоступенчатой стержневой системы необходимо, чтобы $P_{\text{экв}} < P_{\text{кр}}$, т. е. используя (14)–(16) и, учитывая, что для круглого

поперечного сечения $J_{\text{min}} = \frac{\pi d^4}{64}$, получим

$$V_0 < V_{\text{кр}} = \frac{\pi^2 d^2 a}{16(\mu l_1)^2} \left[\tilde{\varepsilon}_1 \left(\frac{b_1}{l_1} \right)^2 + (\tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{\varepsilon}_1) \left(\frac{b_2}{l_1} \right)^2 + (\tilde{\varepsilon}_3 - \tilde{\varepsilon}_2) \left(\frac{b_3}{l_1} \right)^2 + (\tilde{\varepsilon}_i - \tilde{\varepsilon}_3) \left(\frac{b_i}{l_1} \right)^2 + (\tilde{\varepsilon}_n - \tilde{\varepsilon}_i) \left(\frac{b_n}{l_1} \right)^2 \right]^{-1}. \quad (17)$$

Формула (17) применима для расчета критической предупредительной скорости многоступенчатой стержневой системы с любым числом однородных участков.

Пример 2

Рассмотрим удар о жесткую преграду однородных стержней с длинами $l_1 = l_2 = 0,5l$. Соотношение площадей поперечных сечений первого и второго стержней $\tilde{A} = \frac{A_1}{A_2} = 0,5$ (рис. 3).

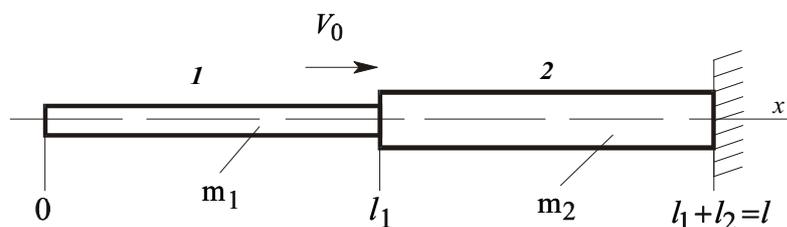


Рис. 3. Схема удара однородного стержня меньшего поперечного сечения о стержень, взаимодействующий с жесткой преградой

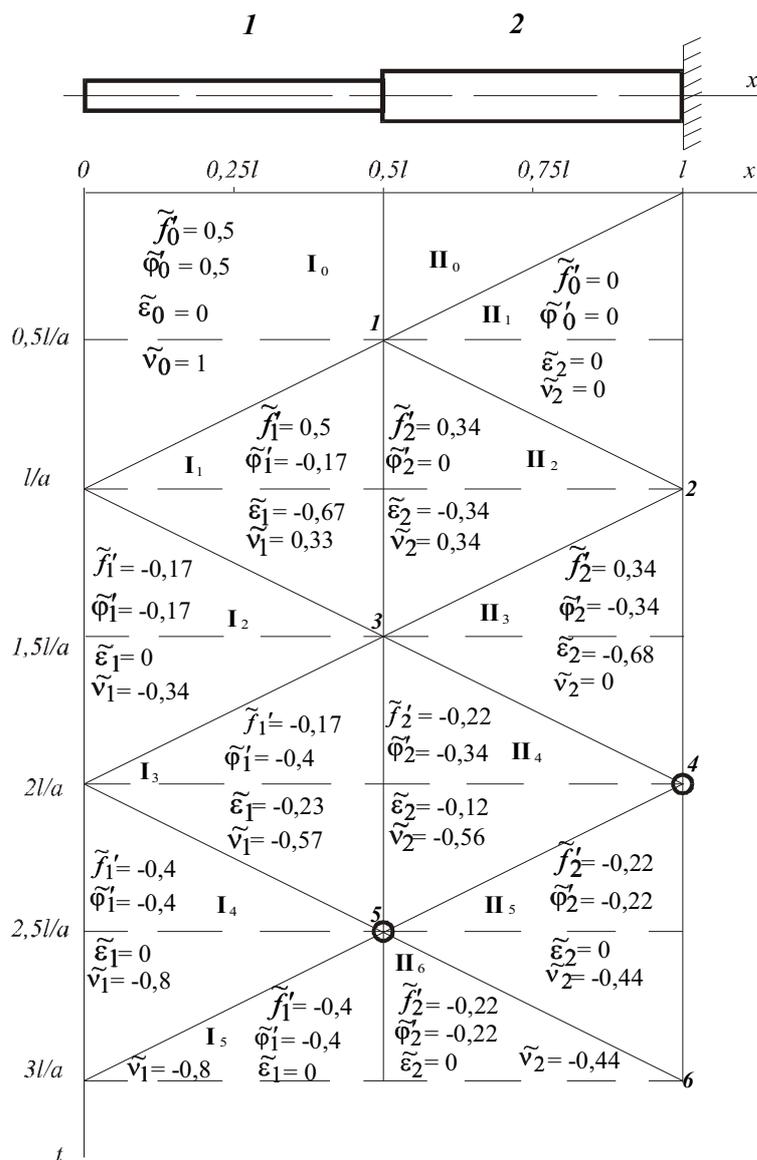


Рис. 4. Поле состояний при ударе однородного стержня меньшего поперечного сечения о стержень, взаимодействующий с жесткой преградой

Применим метод характеристик для построения поля состояний (рис. 4). Области состояний $I_0 - I_5$, $II_0 - II_6$ с соответствующими значениями $\tilde{f}'(at - x)$, $\tilde{\varphi}'(at + x)$, $\tilde{\varepsilon}(x, t)$, $\tilde{v}(x, t)$ определяют параметры прямых и обратных волн деформаций, продольную деформацию и скорость поперечных сечений. Длительность состояния для произвольного сечения определяется разностью ординат t , которые имеют точки наклонных линий для рассматриваемого сечения.

По данным поля состояний (рис. 4) строим диаграмму относительной продольной деформации $\tilde{\varepsilon}$ (рис. 5).

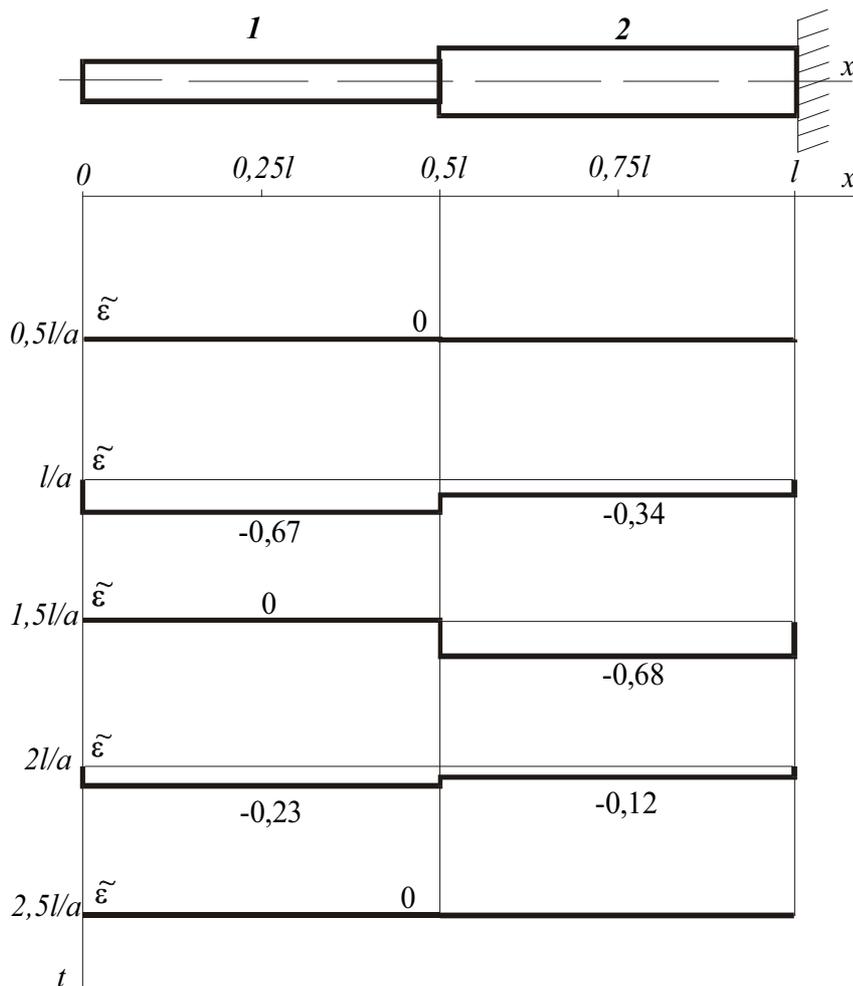


Рис. 5. Диаграмма относительной продольной деформации

Анализируя диаграмму, можно сделать вывод, что максимальное значение относительной продольной деформации на первом стержне имеет место при $t=1,0l/a$ ($\tilde{\epsilon}_{\max}=-0,67$). На втором стержне $\tilde{\epsilon}_{\max}=-0,68$ при $t=1,5l/a$. Следовательно, в данные моменты времени при достижении предударной скорости некоторого критического значения стержневая система может потерять устойчивость. Для расчета критической предударной скорости используем полученную формулу (17), в которую подставляем одно единственное значение относительной продольной деформации для каждого стержня: сначала $\tilde{\epsilon}_{\max}=-0,67$ для первого, затем $\tilde{\epsilon}_{\max}=-0,68$ для второго, получив два значения критической скорости. Учитывая коэффициент приведения длины $\mu=1$, соответствующий неустойчивым связям в сечении их взаимодействия и в сечении, взаимодействующим с жесткой преградой, получим соответствующие значения предударной скорости $V_{кр}=0,37 \frac{\pi^2 d^2 a}{(l)^2}$ для первого и $V_{кр}=0,36 \frac{\pi^2 d^2 a}{(l)^2}$ для второго стержней. Анализируя полученный результат, заключаем, что потеря устойчивости рассматриваемой стержневой системы наступит при $t=1,0l/a$, поскольку в данный момент времени достигается критическое значение предударной скорости для первого стержня.

Заключение

Применяя рассмотренный подход, можно рассчитать минимальную величину критической предударной скорости, при которой ступенчатая стержневая система любой конфигурации теряет устойчивое состояние при продольном ударе. Таким образом, волновая модель с применением метода характеристик позволяет получить достаточно простое решение задачи потери устойчивости при ударном взаимодействии.

Литература

1. Алимов, О.Д. Распространение волн деформаций в ударных системах / О.Д. Алимов, В.К. Манжосов, В.Э. Еремьянц. – М.: Наука, 1985. – 354 с.
2. Алфутов, Н.А. Основы расчета на устойчивость упругих систем / Н.А. Алфутов. – М.: Машиностроение, 1978. – 312 с.
3. Битюрин, А.А. Моделирование продольного удара однородных стержней при неустойчивых связях / А.А. Битюрин, В.К. Манжосов // Вестник УлГТУ. – 2005. – № 3. – С. 23–25.
4. Вольмир, А.С. Исследование процесса выпучивания стержней при ударе / А.С. Вольмир, И.Г. Кильдибеков // Доклады АН СССР. – 1966. – Т. 2. – Вып. 10. – С. 10–17.
5. Вольмир, А.С. Устойчивость упругих систем / А.С. Вольмир. – М.: ГИТТЛ, 1962. – 880 с.
6. Дарков, А.В. Сопротивление материалов / А.В. Дарков, Г.С. Шпиро. – М.: Высшая школа, 2003. – 641 с.
7. Лаврентьев, М.А. Динамические формы потери устойчивости упругих систем / М.А. Лаврентьев, А.Ю. Ишлинский // Доклады АН СССР. – 1949. – Т. 65, № 6. – С. 42–45.
8. Малый, В.И. Длинноволновое приближение в задачах о потере устойчивости при ударе / В.И. Малый // Известия АН СССР. МТТ. – 1972. – № 4. – С. 138–144.
9. Малый, В.И. Выпучивание стержня при продольном ударе. Малые прогибы / В.И. Малый // Известия АН СССР. МТТ. – 1973. – № 4. – С. 181–186.
10. Малый, В.И. Выпучивание стержня при продольном ударе. Большие прогибы / В.И. Малый // Известия АН СССР. МТТ. – 1975. – № 1. – С. 52–61.
11. Малышев, Б.М. Устойчивость стержня при ударном сжатии / Б.М. Малышев // Известия АН СССР. МТТ. – 1966. – № 4. – С. 137–142.
12. Пановко, Я.Г. Устойчивость и колебания упругих систем / Я.Г. Пановко, И.И. Губанова. – М.: Наука, 1987. – 352 с.
13. Писаренко, Г.С. Справочник по сопротивлению материалов / Г.С. Писаренко, А.П. Яковлев, В.В. Матвеев // Киев: Наукова думка, 1989. – 732 с.
14. Тимошенко, С.П. Устойчивость стержней, пластин и оболочек / С.П. Тимошенко // М.: Наука, 1974. – 808 с.
15. Битюрин, А.А. Продольный удар неоднородного стержня о жесткую преграду / А.А. Битюрин, В.К. Манжосов // Ульяновск: Изд-во УлГТУ, 2009. – 164 с.

Поступила в редакцию 21 февраля 2010 г.

STABILITY LOSS OF THE HOMOGENEOUS CORE AT LONGITUDINAL IMPACT ON THE CORE, INTERACTING WITH THE HARD BARRIER

Mathematical modeling of longitudinal elastic central impact of a homogeneous core of a smaller cross-section on the homogeneous core integrating with a hard barrier with unilateral constraints in contact and impact sections is carried out. The rate of critical preimpact speed leading to loss of stability in the considered core system is simulated.

Keywords: longitudinal impact, stability, deformation, mathematical modeling, speed, hard barrier, core.

Bityurin Anatoly Aleksandrovich is a doctoral candidate, Ulyanovsk State Technical University.

Битюрин Анатолий Александрович – докторант, Ульяновский государственный технический университет.

e-mail: denjgy0706@yandex.ru

УЧЕТ ГЕОМЕТРИЧЕСКОЙ НЕЛИНЕЙНОСТИ В РАСЧЕТАХ НЕУПРУГОГО ДЕФОРМИРОВАНИЯ КОНСТРУКЦИЙ. ДЕКОМПОЗИЦИЯ ДЕФОРМАЦИИ

О.С. Садаков, А.О. Щербакова

На примере одноосного напряженного состояния показано разделение деформации на обратимую и необратимую составляющие. Необратимая деформация определяется пластическим удлинением, накопленным за историю деформирования, а обратимая – термоупругая – в общем случае не разделяется на упругую и тепловую. Для иллюстрации приведены два примера переменного термомеханического нагружения стержня.

Ключевые слова: геометрическая нелинейность, упругая деформация, тепловая деформация, пластическая деформация, термомеханическое нагружение.

Введение

Существующие методы оценки прочности конструкций в подавляющем большинстве основаны на гипотезе бесконечной малости перемещений, что существенно упрощает расчеты. Однако во многих случаях учет нелинейности может не только количественно, но и качественно изменить результат. Развитие геометрически нелинейных подходов сдерживается недостаточной пока ясностью их теоретических основ, начиная с базовых понятий о мерах напряженного и деформированного состояний [1, 2]. Определенную помощь в этом смысле может оказать анализ поведения простейших конструкций. Ниже с этой целью рассмотрен случай одноосного напряженного состояния на примере деформирования однородного неупругого стержня под действием нормальной силы и температуры.

Дисторсия

В расчетах на прочность материал конструкции моделируется в виде сплошной однородной среды. При этом делается допущение о том, что гладкие материальные волокна и пленки при деформировании остаются гладкими. Отсюда следует дифференцируемость полей смещений $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ (\mathbf{x} – радиус-вектор материальной точки в недеформированном состоянии). В любой точке такой среды существует градиент смещений $\mathbf{u}\nabla \equiv \mathbf{D}$, связывающий начальное положение элементарного материального волокна $d\mathbf{x}$ с его изменением $d\mathbf{u}$:

$$d\mathbf{u} = \mathbf{D} \cdot d\mathbf{x}. \quad (1)$$

Здесь точкой обозначено скалярное произведение ближайших к ней векторов (тензор дисторсии \mathbf{D} представляет сумму диад). Элементарное материальное волокно $d\mathbf{x}$ (рис. 1) в результате деформирования и (или) поворота окрестности точки \mathbf{x} преобразуется в волокно $d\mathbf{r}$, где \mathbf{r} – радиус-вектор материальной точки в текущий момент времени, $\mathbf{r} = \mathbf{x} + \mathbf{u}$:

$$d\mathbf{r} = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{x}, \quad \mathbf{F} \equiv \mathbf{I} + \mathbf{D}, \quad (2)$$

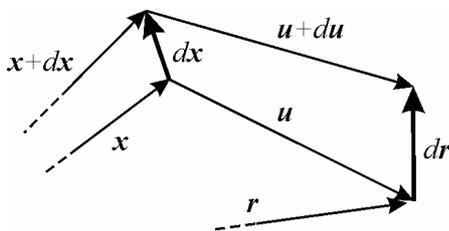


Рис. 1. Элементарное волокно до и после деформации

\mathbf{I} – тензор тождественного преобразования. Таким образом, бесконечное множество элементарных волокон $d\mathbf{x}$ в окрестности точки \mathbf{x} смещается на величину $\mathbf{u}(\mathbf{x})$ и преобразуется в упорядоченное множество $d\mathbf{r}$, определяемое двухвалентным тензором \mathbf{F} , характеризуемым всего девятью числами (координатами). Тензор \mathbf{F} часто неоправданно называют градиентом деформаций¹. Более корректно называть его дисторсией, так как он определяет и деформацию элемента объема тела, и его поворот.

Если дисторсия вызывается разными причинами – например, тепловым воздействием (соответствующую дисторсию обозначим \mathbf{F}_T) и упругими деформациями, связанными с напряжениями

¹ Градиент деформации – трехвалентный тензор, характеризуемый 27 координатами.

(дисторсия F_e), – то результирующее преобразование $dx \rightarrow dr$ определяется произведением этих линейных преобразований

$$F = F_e \cdot F_T \quad (3)$$

(результат ряда линейных операций определяется произведением операторов). Приведенное выражение означает, что элемент объема был сначала нагрет (охлажден), а потом дополнительно деформирован приложенными напряжениями, характеризующимися тензором σ (тензор напряжений Коши в деформированной среде).

Названные дисторсии обычно бывают достаточно близки к единичному тензору I . Поэтому для удобства вводят тензоры $D_e = F_e - I$, $D_T = F_T - I$ (также называемые дисторсиями) и с некоторой погрешностью произведение (3) заменяют суммой

$$D = D_e + D_T. \quad (4)$$

Здесь порядок воздействия (тепловое воздействие – силовое или наоборот) безразличен. Симметричные части дисторсий (4) называют деформациями $\varepsilon = \varepsilon_e + \varepsilon_T$ (та же аддитивность).

Эти довольно стандартные для прочностных расчетов выражения основываются на гипотезе о бесконечной малости составляющих дисторсии. Например, если компоненты тензора дисторсии имеют порядок одного процента, то ошибка от замены строгого выражения (3), из которого следует, что

$$D = (D_e + I) \cdot (D_T + I) - I = D_e + D_T + D_e \cdot D_T$$

суммой (4) имеет порядок 2 %.

Одноосное напряженное состояние

Переходя к более корректному (нелинейному) подходу, рассмотрим следующий простейший случай: среда изотропна, напряженное состояние одноосно. Пусть, например, это будет однородный стержень длиной l_0 , нагружаемый продольной силой N . Текущее значение площади поперечного сечения стержня равно S ; ось стержня определяется ортом i ; нормальное напряжение σ в стержне равно отношению N/S (тензор напряжений равен σ_{ii}).

Деформированное состояние продольно растягиваемого стержня, очевидно, является трехосным, но нас будет интересовать только осевая составляющая деформации $\varepsilon = \Delta l/l_0$ (Δl – приращение длины стержня). Коэффициент длины стержня k представляет отношение l/l_0 , где l – текущая длина стержня; отсюда $k = 1 + \varepsilon$.

Составляющие деформации

Ограничим круг составляющих рассматриваемой деформации стержня тремя ее основными видами: тепловой, упругой и неупругой.

Неупругая деформация $\varepsilon_p = \Delta l_p/l_0$ (Δl_p – неупругое удлинение стержня) связана со сдвигами, в результате которых происходят разрывы связей между частицами среды и устанавливаются новые – с другими соседними частицами. Это определяет необратимость неупругой деформации. Соответствующий коэффициент длины стержня равен

$$k_p = (l_0 + \Delta l_p)/l_0 = 1 + \varepsilon_p. \quad (5)$$

Тепловая деформация, в отличие от деформации ε_p , обратима; она связана с изменением интенсивности теплового движения частиц среды. С ростом температуры происходит увеличение среднестатистического расстояния между частицами среды. При нагреве свободного стержня (изменение температуры обозначим T) его длина возрастает на величину Δl_T ; соответствующий коэффициент длины зависит от текущего значения T :

$$k_T = (l_0 + \Delta l_T)/l_0 = 1 + \varepsilon_T, \quad \varepsilon_T = f(T). \quad (6)$$

Тепловая деформация *свободного* стержня $f(T) = \Delta l_T/l_0$ представляет механическую характеристику конкретного материала. При возврате к начальной температуре она становится равной нулю.

При *упругом* растяжении *свободного* стержня он вытягивается на величину $\Delta l_e = g(\sigma)l_0$; соответственно

$$k_e = (l_0 + \Delta l_e)/l_0 = 1 + \varepsilon, \quad \varepsilon_e = g(\sigma); \quad (7)$$

величина $\varepsilon_e = \Delta l_e/l_0 = g(\sigma)$ – механическая характеристика материала. Напряжение, как и температура, приводит к изменению среднестатистического расстояния между частицами; при этом в межатомных связях запасается потенциальная энергия, которая затем при разгрузке полностью

возвращается нагружающему устройству. Упругая деформация, как и тепловая, обратима и зависит лишь от мгновенного значения напряжения.

Упругопластическое деформирование

Названные три типа деформации практически не встречаются по отдельности, но вопрос об их вкладе в общую деформацию ε (или $k = \varepsilon + 1$) оказывается нетривиальным.

Упругопластическое деформирование вполне типично: необратимые сдвиги, приводящие к пластическому удлинению стержня, вызываются напряжениями, то есть сопровождаются упругими деформациями. Необратимость пластической деформации и обратимость упругой позволяют в любой стадии упругопластического деформирования мысленно произвести разгрузку. Упругие деформации при этом исчезают, а пластическая *вытяжка* стержня остается. Логично считать поэтому, что пластическая деформация ε_p в любой момент истории нагружения определяется необратимым удлинением Δl_p , отнесенным к *начальной* длине l_0 ; $k_p = 1 + \varepsilon_p$ – пластический коэффициент длины; выражение (5) относится не только к остаточному, но и к нагруженному состоянию.

Возвращаясь постепенно к состоянию до начала разгрузки (восстанавливая напряжение, гипотетически положительное), заметим, что стержень длиной $l_0 + \Delta l_p$ все сильнее упруго вытягивается под действием возрастающего напряжения. При этом, очевидно, чем больше предварительная пластическая вытяжка Δl_p , тем сильнее изменится длина стержня при приложении нагрузки (мы здесь полагаем, что пластическое удлинение не влияет на упругие свойства стержня, определяемые функцией $g(\sigma)$ (7)). Отсюда следует, в частности, что упругое удлинение пластически вытянутого стержня определяется выражением

$$\Delta l_{e(p)} = g(\sigma)(l_0 + \Delta l_p). \quad (8)$$

Соответственно, коэффициент длины оказывается равным

$$k = k_{ep} = (l_0 + \Delta l_p + \Delta l_{e(p)})/l_0 = k_e k_p; \quad l = k_{ep} l_0. \quad (9)$$

Здесь $k_e = 1 + g(\sigma)$ – зависит только от σ , как и при упругой работе.

Термоупругая деформация

Тепловая деформация (6), как и упругая (7), обратима. Если функция $g(\sigma)$ не меняется при нагреве, а функция $f(T)$ не зависит от нагрузки, то при упругом деформировании нагретого стержня происходит упругая вытяжка стержня длиной $k_T l_0$. Результирующий коэффициент длины

$$k = l/l_0 = k_e k_T = (1 + g(\sigma))(1 + f(T)) = 1 + g(\sigma) + f(T) + g(\sigma)f(T). \quad (10)$$

То же выражение справедливо и при нагреве растянутого стержня. Однако реальная ситуация более сложна: с изменением температуры свойства упругости, очевидно, изменяются. Не исключено и влияние напряжения на коэффициент теплового расширения. Поэтому выражение (10) следует заменить, введя общий коэффициент длины k_{eT} , характеризующий обратимую деформацию, обобщенно определяющую влияние текущих значений напряжения и температуры

$$k_{eT} = 1 + \varphi(\sigma, T). \quad (11)$$

Обратимая деформация (будем называть ее термоупругой) представляет собой функцию двух аргументов $\varepsilon_{eT} = \varphi(\sigma, T) = \Delta l_{eT}/l_0$, где Δl_{eT} – удлинение стержня в результате воздействия температуры и напряжения. Полагаем, что разделить ее на составляющие ε_e и ε_T в общем случае не удастся.

Термоупругопластическая деформация

В общем случае деформация представляет сочетание термоупругой и неупругой деформаций; первая обратима, последняя нет. При наличии пластической деформации наложение термоупругой ведет к термоупругому деформированию, в котором начальная длина l_0 должна быть заменена на $k_p l_0$. Напомним, что коэффициент k_p определяется пластическим удлинением Δl_p , отнесенным к *начальной* длине стержня, независимо от текущей длины (возможно, заметно отличающейся от начальной), зависящей от текущих значений σ и T .

Экспериментальное определение функции φ

Каждый материал характеризуется своей функцией $\varphi(\sigma, T)$ (рис. 2); она может быть найдена из соответствующих испытаний.

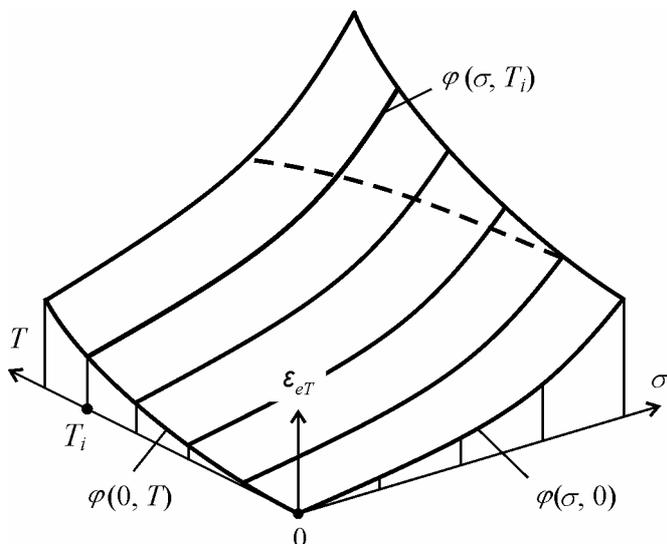


Рис. 2. Часть функции φ (при $\sigma > 0, T > 0$). Выделены изотермы $\varphi(\sigma, T_i)$

на возвращаться к размеру $l = (1 + \varphi(0, T_i))l_0$. В частности, может выполняться закон Гука:

$$\varphi(\sigma, T) = \varphi(0, T) + \sigma/E(T), \tag{13}$$

тогда поверхность $\varphi(\sigma, T)$ линейчатая.

Остаточная деформация

Выявляя характеристику материала $\varphi(\sigma, T)$, необходимо делать разгрузки, чтобы удостовериться в обратимости деформации, позволяющей использовать выражение

$$\varphi(\sigma^*, T_i) = (l(\sigma^*, T_i) - l(0, T_i))/l(0, T_i).$$

Здесь σ^* – значение напряжения в момент начала разгрузки, T_i – значение температуры в опыте. С ростом температуры и напряжения (при выходе за некоторую условную границу, показанную на рис. 2 штриховой линией) при разгрузке начнет появляться заметная остаточная деформация (рис. 3): длина образца не возвращается к значению $(1 + \varphi(0, T_i))l(0, T_i)$. Это означает, что в процессе нагружения и разгрузки произошло неупругое (пластическое и/или вязкое) деформирование. Если допустить, что в процессе разгрузки неупругая деформация не изменилась, то из удлинения $\Delta l(\sigma^*, T_i)$, отвечающего максимальному напряжению σ^* , следует вычесть остаточное. Полученное удлинение позволяет найти значение термоупругой деформации в зоне неупругих деформаций:

$$\varphi(\sigma^*, T_i) = (l(\sigma^*, T_i) - \Delta l_p)/l_0. \tag{14}$$

Если нет уверенности в упругости разгрузки (например, если материал обладает заметной вязкостью), то необходимо выявить реологические свойства среды, вводя и проверяя соответствующие модели пластичности и ползучести. Добавим, что этот – существенно более сложный – этап исследования в любом случае необходим для проведения прочностных расчетов конструкций.

Примеры расчета

Для иллюстрации приведем два простых примера расчета эволюции коэффициентов длины неупругого стержня при заданной истории нагружения. Первый пример относится к гипотетическому случаю идеально пластического материала (известны модуль Юнга E и предел текучести σ_T). Задается история изменения температуры и коэффициента длины (табл. 1). Функция φ принята в виде $\varphi(\sigma, T) = \alpha T + \sigma/E$. В первом столбце таблицы указан номер этапа.

Проще всего найти вначале функцию $\varphi(0, T)$, измеряя деформацию нагреваемого стержня. Часто она описывается квадратной параболой

$$\varphi(0, T) = \alpha T + \beta T^2. \tag{12}$$

Вторым слагаемым в этом выражении часто пренебрегают.

Далее необходимы, очевидно, испытания при ненулевых напряжениях, хотя это потребует более сложной экспериментальной процедуры.

Пока напряжения малы, нагретые образцы при ряде значений температуры $T = T_i = \text{const}$ следует растягивать или сжимать, получая при этом изотермы $\varphi(\sigma, T_i) = \Delta l(\sigma, T_i)/l_0$. Напомним, что l_0 – длина образца до нагрева и до приложения нагрузки. При разгрузке длина долж-

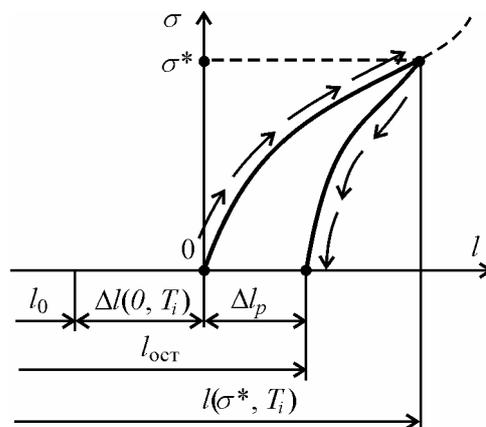


Рис. 3. Остаточное удлинение

Таблица 1

№	Температура	Напряжение	Коэффициент длины
1	0	σ_T	$1 + \sigma_T/E$
2	T	σ_T	$1 + \sigma_T/E + \alpha T$
3	T	σ_T	$1 + \sigma_T/E + \alpha T + \Delta k_3$
4	0	σ_T	$1 + \sigma_T/E + \Delta k_3$
5	0	0	$1 + \Delta k_3$

На первом этапе стержень растянут до достижения напряжением значения σ_T . Затем при постоянном напряжении производится нагрев: стержень удлиняется (или укорачивается, если $T < 0$). На третьем этапе производится вытяжка на величину Δk_3 . Величина Δk_3 представляет относительное пластическое удлинение $p = \Delta l_p/l_0$. Затем следует возврат к начальной температуре и, наконец, снятие нагрузки.

В другом примере (табл. 2) рассмотрен стержень из материала с линейным упрочнением (модель Ишлинского–Прагера). В этом случае может быть задана история изменения напряжения (и температуры). Вид диаграммы неупругого деформирования при изотермическом нагружении, разгрузке и нагружении обратного знака показан на рис. 4.

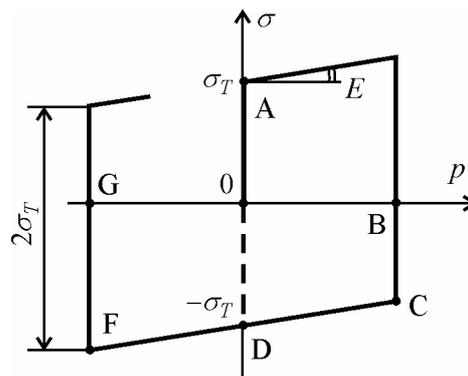


Рис. 4. Модель Ишлинского–Прагера

Таблица 2

№ п.п.	Напряжение	Температура	Коэффициент длины
1	0	T_1	$1 + \alpha T_1$
2	σ_T	T_1	$1 + \alpha T_1 + \sigma_T/E$ (точка А на рис. 4)
3	$\sigma_T + \Delta \sigma$	T_1	$(1 + \alpha T_1 + (\sigma_T + \Delta \sigma)/E)(1 + \Delta \sigma/E)$
4	$\sigma_T + \Delta \sigma$	0	$(1 + (\sigma_T + \Delta \sigma)/E)(1 + \Delta \sigma/E)$
5	0	0	$1 + \Delta \sigma/E'$ (точка В)
6	$\Delta \sigma - \sigma_T$	0	$(1 + (\sigma_T - \Delta \sigma)/E)(1 + \Delta \sigma/E)$ (точка С)
7	$-\sigma_T$	0	$1 - \sigma_T/E$ (точка D)
8	$-\sigma_T - \Delta' \sigma$	0	$(1 - (\sigma_T + \Delta' \sigma)/E)(1 - \Delta' \sigma/E)$ (точка F)
9	0	T_2	$(1 + \alpha T_2)(1 - \Delta' \sigma/E)$ (точка G)
10	σ_T	T_2	$1 + \alpha T_2 + \sigma_T/E$ (точка А)

Тензор дисторсии

В общем случае для описания напряженно-деформированного состояния элементов конструкций используется, очевидно, тензорный аппарат. Напряжения в деформированной среде описываются тензором напряжений Коши; другие тензоры напряжений, фигурирующие в соответствующей литературе, имеют весьма туманные обоснования. Для описания деформированного состояния, обобщая предложенную в статье идеологию, можно использовать тензор дисторсии F в виде произведения трех сомножителей

$$F = R \cdot V_{eT} \cdot V_p, \quad (15)$$

где V_p – симметричный тензор коэффициентов длины, связанный с неупругими деформациями; произведение трех его главных значений равно единице – ввиду требования пластической несжимаемости. Тензор V_{eT} – симметричный тензор термоупругих коэффициентов длины, однозначно зависящих от мгновенных значений тензора напряжений и температуры. Произведение симметричных тензоров не обязательно симметрично, и произведение $V_{eT} \cdot V_p$, если их главные

оси не совпадают, представляет произведение некоторого ортогонального тензора жесткого поворота и симметричного тензора коэффициентов длины. Кроме того, в деформируемой конструкции могут возникать дополнительные повороты, связанные с движениями остальных элементов объема среды и зависящие от граничных условий. Поэтому в выражении (15) фигурирует еще один ортогональный тензор \mathbf{R} возможного дополнительного поворота. Он находится в процессе решения краевой (и начальной) задачи о деформировании конструкции.

Заключение

Приведенный анализ термоупругопластического (или термовязкоупругопластического) деформирования простейшей конструкции (например, фермы) позволил обосновать структуру коэффициента длины в геометрически нелинейном подходе, а также предложить обобщение полученных результатов на произвольное напряженно-деформированное состояние. Последнее, по-видимому, потребует дальнейшего более детального расчетного обоснования.

Литература

1. Lee, E.H. Finite strain elastic-plastic theory with application to plane-wave analysis / E.H. Lee, D.T. Liu // J. Appl. Phys. – № 38. – С. 19–27.
2. Stumpf, H. Constitutive model and incremental shakedown analysis in finite elastoplasticity / H. Stumpf // Inelastic behavior of structures under variable loads. – 1995. – С. 293–307.
3. Садаков, О.С. К расчетам напряженно-деформированного состояния конструкций в геометрически нелинейной постановке / О.С. Садаков // Труды Международной конференции «Снежинск и наука – 2003. Современные проблемы атомной науки и техники». – Снежинск: СГФТА. – 2003. – С. 73–74.
4. Садаков, О.С. О корректности решения геометрически нелинейных задач пакетом МКЭ / О.С. Садаков, А.А. Шапиро // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2003. – Вып. 4. – № 8(24). – С. 72–77.
5. Буслаева, О.С. Концепция лабораторной системы отчета в геометрически и физически нелинейных задачах / О.С. Буслаева, О.С. Садаков, А.А. Шапиро // Математическое моделирование и краевые задачи: труды Всероссийской научной конференции 26–28 мая 2004 года. Самарский государственный технический университет. – 2004. – Ч. 1. – С. 46–48.

Поступила в редакцию 11 февраля 2010 г.

CONSIDERING THE GEOMETRICAL NONLINEARITY IN CALCULATION OF INELASTIC DEFORMATION OF STRUCTURES. DECOMPOSITION OF STRAINS

The article shows splitting of a deformation on a reversible and an irreversible component when considering the uniaxial stress state. The irreversible deformation is defined by a plastic lengthening which has been accumulated during the whole history of the deformation. The reversible (thermoelastic) deformation cannot be divided into an elastic deformation and a thermal one. Two examples of variable thermomechanical loading of a rod are shown.

Keywords: geometrical nonlinearity, elastic deformation, thermal deformation, plastic deformation, thermomechanical loading.

Sadakov Oleg Sergeevich is Professor, Dr. Sc. (Engineering), Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, Physics Faculty, South Ural State University.

Садаков Олег Сергеевич – профессор, доктор технических наук, кафедра прикладной механики, динамики и прочности машин, физический факультет, Южно-Уральский государственный университет.

Scherbakova Alla Olegovna is Cand.Sc. (Engineering), Applied Mechanics, Dynamics and Strength of Machines Department, Physics Faculty, South Ural State University.

Щербакова Алла Олеговна – кандидат технических наук, кафедра прикладной механики, динамики и прочности машин, физический факультет, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: AllaScherbakova@list.ru

СЕНСИБИЛИЗАЦИЯ В КРИСТАЛЛАХ РУБИНА, АКТИВИРОВАННЫХ ВЫСОКОЙ КОНЦЕНТРАЦИЕЙ ИОНОВ ТИТАНА

А.Н. Брызгалов, А. В. Колотилов, В.М. Акимова

Исследовано влияние примеси ионов титана в кристаллах рубина, введенных в процессе выращивания по двум критериям: оптическим и люминесцентным свойствам. Установлено, что в случае малой концентрации ионов титана $\sim 0,003$ вес. % титан способствовал сохранению концентрации активных ионов хрома. Введение высокой концентрации ионов титана в кристаллы рубина приводит к образованию сенсibilизированной люминесценции на ионах Cr^{3+} и Ti^{3+} .

Ключевые слова: рубин, сенсibilизация, титан, хром, концентрация, спектр, термолюминесценция.

Введение

Введением высокой концентрации ионов титана в кристаллы рубина в процессе их выращивания преследовалась цель получения материала со структурой $\text{Al}_2\text{O}_3:\text{Ti}^{3+}:\text{Cr}^{3+}$, где поглощение энергии происходит на широких уровнях накачки ионов хрома, а центрами люминесценции преимущественно являются активированные ионы титана, имеющие несколько метастабильных уровней излучения.

Базовыми объектами исследований явились кристаллы рубина высокого оптического качества, выращенных методом Вернейля в направлении $[11\bar{2}0]$, т.е. по наиболее устойчивой поверхности роста $(11\bar{2}0)$, из шихты $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, со структурой, сходной с кристаллом рубина. Концентрация ионов Ti^{3+} , изоморфно замещающих ионы Al^{3+} , была от 0,2 вес. % при концентрации $\text{Cr}^{3+} \sim 0,05$ %.

Для определения возникновения сенсibilизированной люминесценции были проведены исследования методами оптической спектроскопии и термолюминесценции.

Исследование спектральным оптическим методом

Спектры поглощения Ti^{3+} , Cr^{3+} в корунде исследовались при комнатной температуре спектрофотометром СФ-56 (погрешность прибора ~ 1 %).

В ходе исследования кристаллов корунда, активированных только ионами Cr^{3+} была получена серия спектров, общий вид которых представлен на рис. 1.

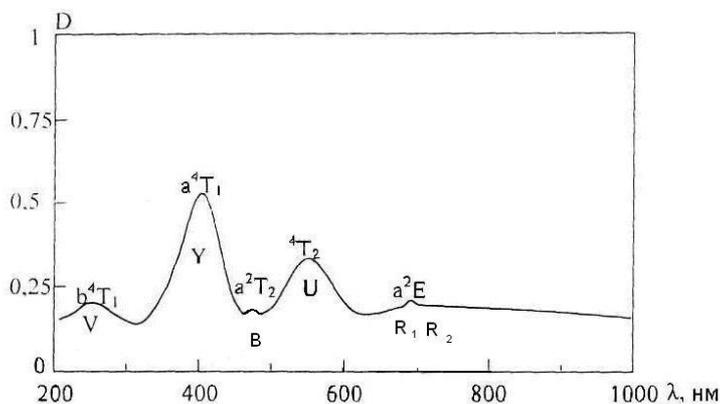


Рис. 1. Кривая спектрального поглощения рубина, содержащего ионы хрома

Положение основных полос поглощения рубина показано в табл. 1.

Таблица 1

Обозначение полосы	Электронный переход	Максимум поглощения ($T = 300 \text{ K}$)	
		λ , нм	ν , см^{-1}
U (Cr^{3+})	${}^4\text{A}_2 \rightarrow {}^4\text{T}_2$	555	18000
B (Cr^{3+})	${}^4\text{A}_2 \rightarrow \text{a}^2\text{T}_2$	476	21068
Y (Cr^{3+})	${}^4\text{A}_2 \rightarrow \text{a}^4\text{T}_1$	410	24400
V (Cr^{3+})	${}^4\text{A}_2 \rightarrow \text{b}^4\text{T}_1$	260	39000
R ₁	${}^4\text{A}_2 \rightarrow \text{a}^2\text{E}$	694,3	14398
R ₂	${}^4\text{A}_2 \rightarrow \text{a}^2\text{E}$	692,9	14427

Экспериментально полученное положение полос (рис. 2) совпадает с теоретическими расчетами, представленными в литературе [3].

Широкие полосы V,U и Y используют для накачки кристаллов, полоса B является промежуточной между широкими уровнями, R₁, R₂ – линии связаны с резонансным переходом ${}^4\text{A}_2 \rightarrow \text{a}^2\text{E}$, который является рабочим переходом в оптическом квантовом генераторе.

В оптических спектрах поглощения кристаллов активированных ионами хрома, титана (рис. 2) выражены две полосы поглощения.

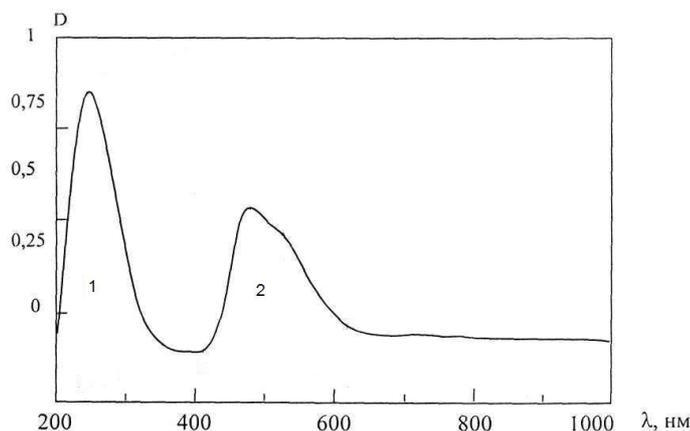


Рис. 2. Кривая спектрального поглощения рубина, содержащего ионы хрома и титана

Первая интенсивная полоса в ультрафиолетовой области с максимумом 230 нм связана с переходом электронов из d- в s- состояние ионов Ti^{3+} (рис. 2). Вторая широкая полоса, имеющая асимметричную форму, обусловлена наложением двух полос с максимумами 490 нм и перегибом в области 540 нм (рис. 2), обусловленную переходом ${}^2\text{T}_2 \rightarrow {}^2\text{E}$ (рис. 4). Ионы Ti^{3+} ($0,76 \text{ \AA}$) как и ионы Cr^{3+} ($0,63 \text{ \AA}$) в решетке Al_2O_3 изоморфно замещают ионы Al^{3+} ($0,51 \text{ \AA}$), при этом ионы Ti^{3+} находятся в деформированных октаэдрах с локальной симметрией C_3 .

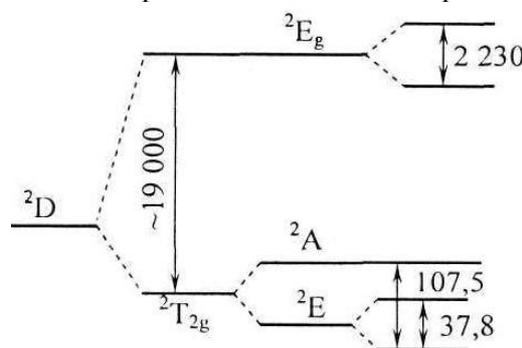


Рис. 3. Электронная конфигурация $3d^1$ иона титана

Основное состояние свободного иона Ti^{3+} является ${}^2\text{D}$ с электронной конфигурацией $3d^24s^2$. Ионы уровня $3d^2({}^2\text{D})$ расщепляется в октаэдрическом КП на два уровня ${}^2\text{T}_{2g}$ и ${}^2\text{E}_{g}$ (рис. 3), энергетический зазор, между которыми зависит от силы поля и для кристалла Al_2O_3 составляет

$10D_q \approx 19000 \text{ см}^{-1}$. Энергетические уровни ионов Cr^{3+} и Ti^{3+} располагаются в запрещенной зоне Al_2O_3 шириной 8,7 эВ. Под действием частичного тетраэдрического КП уровень T_{2g} расщепляется на 2E и 2A . В дальнейшем под действием динамическим эффектом Яна–Теллера происходит расщепление 2E_g на два уровня и 2E и 2A – на три уровня, с которыми связан перегиб, образуя несколько метастабильных уровней титана.

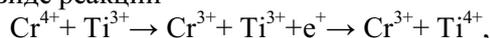
Сенсибилизация заключается в переходе энергии с уровней ионов Cr^{3+} на уровни Ti^{3+} . При возбуждении излучением происходит накачка энергии широких уровней Y и V (рис. 4). С уровня U иона Cr^{3+} передается на b^2E иона Ti^{3+} , с уровня Y сначала энергия передается на уровень B, а затем на уровень b^2E иона Ti^{3+} . А люминесцентное излучение происходит с метастабильных уровней иона Ti^{3+} на 2E_2 и частично с R_1, R_2 иона Cr^{3+} в широком диапазоне 600–820 нм.

Термолюминесценция

Для определения активности люминесценции ионов Cr^{3+} и Ti^{3+} использовали метод термолюминесценции.

Применение метода люминесценции связано с переходом системы в возбужденное состояние посредством облучения кристаллов рубина рентгеновскими лучами от трубки с медным антикатодом при напряжении 33 кВ и токе 12 мА. Регистрация люминесценции посредством термовысвечивания велась с помощью установки ФЭУ-39. Образцы нагревали со скоростью ~ 3 град/мин до температуры 600 К. Результаты термолюминесценции представлены на рис. 5.

В случае использования Cr^{3+} (рис. 5, а) наблюдаются два пика: низкотемпературный в пределах 345–390 К при $T_m = 375$ К и полуширине пика 20 К, обусловленный наличием центров люминесценции на ионах Cr^{4+} , и высокотемпературный в пределах 500–556 К с $T_m = 516$ К, обусловленный излучением на ионах Cr^{3+} с электронным переходом ${}^4A_2 \rightarrow a^2E$. Интенсивность высокотемпературного максимума в 4–5 раз выше по сравнению с низкотемпературным. При внедрении Ti^{3+} концентрации $\sim 0,003$ вес. % (рис. 5, б) в спектре термолюминесценции выделяется только один максимум в пределах 465–530 К с температурой максимума 502 К и полушириной $\Delta T = 24$ К со смещением на 14 К в сторону низких температур. Этот процесс можно представить в виде реакции



согласно которой ионы титана сохраняют концентрацию активной примеси ионов Cr^{3+} при низкой концентрации ионов титана.

При внедрении в кристаллы рубина концентрации ионов Ti^{3+} порядка 0,2 вес. % (рис. 5, в) наблюдается один максимум широкополосной люминесценции в пределах 390–545 К.

В процессе облучения кристалла электроны попадают на активные уровни ионов Cr^{3+} и Ti^{3+} . Вероятность освобождения электронов с уровней в процессе нагревания определяется уравнением

$$p = \omega_0 e^{-\frac{\varepsilon}{kT}},$$

где ω_0 – частотный фактор, ε – энергия активации, которая определяет глубину залегания уровней от нижнего края зоны проводимости кристалла

$$\varepsilon = \frac{2kT_m^2}{\delta T},$$

где T_m – максимум, δT – полуширина спектральной линии. Для ионов Cr^{3+} (рис. 5, б) энергия активации составляет $\varepsilon = 1,83$ эВ, а для ионов титана – $\varepsilon = 0,54$ эВ (рис. 5, в). Получаем, что глубина залегания активных уровней титана меньше в 3,5 раза, чем с уровнями Cr^{3+} , откуда следует, что излучение с уровней ионов Ti^{3+} имеет большую вероятность.

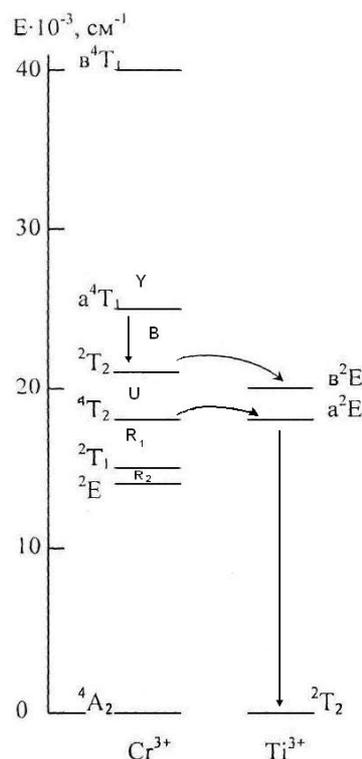


Рис. 4. Энергетические уровни иона титана

Уширение ΔT в этом случае свидетельствует о широком спектре частот излучения. Вследствие того, что энергетические уровни Ti^{3+} лежат близко к уровням Cr^{3+} , то по-видимому механизм переноса энергии является резонансно-безизлучательным. Процесс люминесценции в этом случае является аддитивным. Причем уменьшение длительности и квантового выхода люминесценции сенсбилизатора Cr^{3+} компенсируется увеличением длительности и квантового выхода люминесценции активатора Ti^{3+} . Это открывает возможность получения квантовых генераторов на кристалле $Al_2O_3:Ti^{3+}:Cr^{3+}$ с излучением на нескольких управляемых частотах (табл. 2).

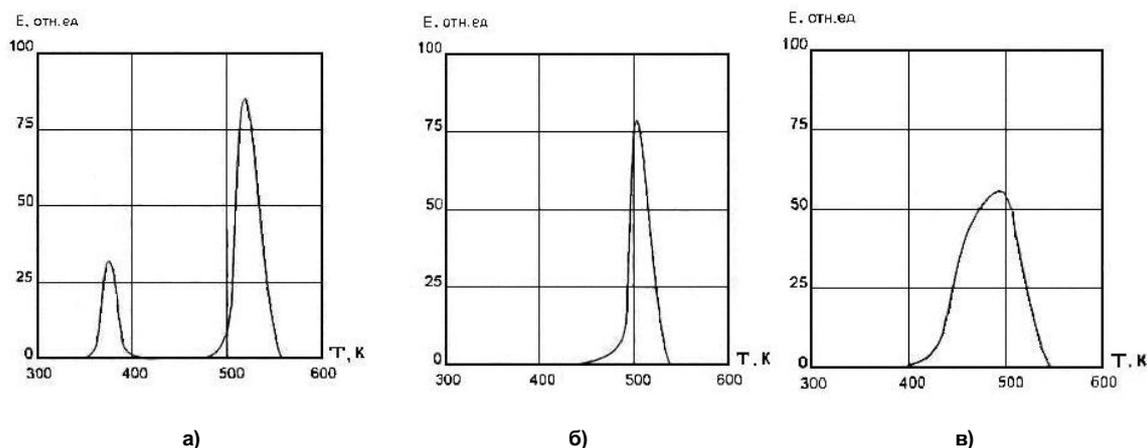


Рис. 5. Зависимость выхода ТЛ трех групп образцов $Al_2O_3:Ti^{3+}:Cr^{3+}$

Таблица 2

Мультиплет	Энергия штарковских уровней, cm^{-1}
Для Cr^{3+}	
4A_2	0
2E	14403
2T_1	15150
4T_2	18300
2T_2	21068
4T_1	25000
Для Ti^{3+}	
2T_2	0
a^2E	18000
b^2E	20408

Выводы

Цель проведенных исследований заключалась в определении влияния примеси ионов титана в кристаллах рубина, введенных в процессе выращивания по двум критериям: оптическим и люминесцентным свойствам. Полученные результаты позволили сделать следующие выводы.

Использование примеси хрома с концентрацией 0,05 вес. % и титана 0,003 % удалось получить кристаллы с минимальной плотностью дефектов при выращивании в направлении $[11\bar{2}0]$ с сохранением активности кристаллов в процессе их использования в качестве активных элементов. В этом случае с применением ионов титана удалось сохранить плотность активных трехвалентных ионов хрома.

Исследование свойств термолюминесценции позволило выявить, что в случае малой концентрации ионов титана $\sim 0,003$ вес. % (поглощение и излучение преимущественно происходило на ионах Cr^{3+}) титан способствовал сохранению концентрации активных ионов хрома. Кроме этого, образование хром-титановых комплексов $Cr_2Ti_2O_7$ позволило понизить температуру плавления оксида хрома, что способствует снижению дефектности кристаллов рубина [6].

Введение высокой концентрации ионов титана в кристаллы рубина, приводит к образованию сенсбилизированной люминесценции на ионах Cr^{3+} и Ti^{3+} . Поглощение энергии происходит на

широких уровнях 4T_1 , 4T_2 ионов хрома с последующей передачей энергии на уровень 2E_2 ионов титана (рис. 4). Люминесценция происходит на ионах Ti^{3+} , соответствующая переходу ${}^2E_2 \rightarrow {}^2T_2$, и частично на Cr^{3+} , занимающая спектральный диапазон 600–820 нм [3].

Высокая механическая прочность, хорошая теплопроводность, фото- и оптическая стойкость, разработанные методики выращивания кристаллов, а также результаты, полученные в ходе исследований кристаллов рубина активированных ионами Ti^{3+} , дают основание полагать о перспективности использования данного материала в качестве рабочего тела оптического квантового генератора, излучающего в широком диапазоне частот.

Литература

1. Высокоэффективный перестраиваемый лазерный преобразователь на кристалле $Al_2O_3:Ti^{3+}$ / Г.С. Круглик, Г.А. Скрипко, А.П. Шкадаревич и др. // Журнал прикладной спектроскопии. – 1985. – Вып. 1. – С. 126–128.
2. Намозов, Б.Р. Структура люминесценции автолокализованного экситона в кристаллах $\alpha-Al_2O_3$ / Б.Р. Намозов, М.Э. Фоминич, В.В. Мюрк // ФТТ. – 1998. – Т. 40. – Вып. 5. – С. 910–912.
3. Перестраиваемый лазер на кристалле $Al_2O_3:Ti^{3+}$ / Б.К. Севастьянов, Х.С. Багдасаров, Е.А. Федоров // Кристаллография. – 1984. – Т. 29. – Вып. 5. – С. 963–964.
4. Мильман, И.И. Температурное тушение в люминесценции анионодефектных кристаллов $\alpha-Al_2O_3$ / И.И. Мильман, В.С. Кортов, В.И. Кирпа // ФТТ. – 1995. – Т. 39. – Вып. 4. – С. 1149–1159.
5. Кортов, В.С. Особенности кинетики термостимулированной люминесценции кристаллов $\alpha-Al_2O_3$ с дефектами / В.С. Кортов, И.И. Мильман, С.В. Никифоров // ФТТ. – 1997. – Т. 39. – Вып. 9. – С. 1538–1544.
6. Брызгалов, А.Н. Зависимость совершенства и излучательной способности кристаллов рубина от термодинамических условий выращивания / А.Н. Брызгалов, А.В. Колотилов, В.М. Акимова // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2009. – Вып. 1. – № 22(155). – С. 29–34.

Поступила в редакцию 4 февраля 2010 г.

SENSITIZATION IN THE RUBY CRYSTALS ACTIVATED BY HIGH CONCENTRATION OF IONS OF THE TITAN

The authors analyzed the influence of an impurity of ions of the titan in ruby crystals introduced in the course of growth by two criteria: optical and luminescent properties. They established that in case of small concentration of ions of the titan ~0,003 weight % the titan contributed preservation of concentration of active ions of chrome. Introduction of high concentration of ions of the titan in ruby crystals, leads to formation of sensitized luminescence on ions of Cr^{3+} and Ti^{3+} .

Keywords: ruby crystal, sensitization, titan, chrome, concentration, spectrum, thermoluminescence.

Bryzgalov Aleksandr Nikolaevich is Dr.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

Брызгалов Александр Николаевич – доктор физико-математических наук, профессор, кафедры общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет.

Kolotilov Aleksandr Valerevich is a post-graduate student, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

Колотилов Александр Валерьевич – аспирант, кафедры общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет.

Akimova Vera Mikhailovna is a post-graduate student of the General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

Акимова Вера Михайловна – аспирант, кафедры общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет.

e-mail: nehestno@mail.ru

ОБ ОСОБЕННОСТЯХ МОДЕЛИРОВАНИЯ ПРОЦЕССОВ КОНДЕНСАЦИИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

А.Г. Воронцов

Методом молекулярной динамики изучена кинетика конденсации пара металла в атмосфере инертного газа и образование металлических кластеров. Показано, что формирование кластеров происходит через формирование метастабильных комплексов с повышенной энергией, которые стабилизируются посредством молекулярных столкновений. Показано, что методика изучения формирования кластера должна включать наблюдение за кинетикой протекания процесса, особенно на ранних стадиях конденсации и для комплексов малого размера.

Ключевые слова: металлические наночастицы, конденсация, численный эксперимент.

Введение

Моделирование процесса конденсации из пересыщенного пара – задача, имеющая научный и практический интерес. Практический интерес обусловлен желанием управлять физико-химическими процессами при проведении газофазных реакций и получении ультрадисперсных порошков, которые используются как катализаторы и присадки во многих технологических процессах. Научный интерес к этой проблеме поддерживается уже более ста лет, т.к. описание процессов возникновения зародышей и роста новой фазы не может быть проведено с количественной точностью в рамках единой теории. Это объясняется тем, что процессы при конденсации носят вероятностный характер, а вклад всех факторов в протекание общего процесса досконально не изучен. Классическая теория зародышеобразования, предложенная Беккером и Дорингом [1], дает приемлемое качественное объяснение основных процессов, но может давать скорость нуклеации, отличающуюся от экспериментального значения на несколько порядков. Более общие теории – теория гетерогенных флуктуаций Френкеля [2] и динамическая теория нуклеации Зельдовича [3] требуют для применения таких параметров, которые относятся к вероятностным процессам столкновения кластеров различных размеров и, следовательно, не могут быть получены с количественной точностью в эксперименте. На сегодняшний день самым перспективным выходом из сложившейся ситуации является использование метода молекулярной динамики, т.е. непосредственного моделирования роста кластеров в пересыщенном паре.

Работы по моделированию получения и изучению свойств наночастиц металлов и Леннард-Джонсовских частиц проводились с конца 70-х годов. Сначала это были работы по изучению устойчивости, формы, энергии небольших (до 500 атомов) кластеров [4]. Затем стали изучаться процессы формирования и роста кластеров [5] и моделирование процессов в камере экспериментальной установки с присутствием буферного газа – охладителя [6]. На сегодняшний день решаются задачи получения полного объема параметров процесса нуклеации для использования их при моделировании методами динамики сплошной среды [7].

В недавней работе [7] было найдено, что методом молекулярной динамики можно обнаружить разделение между нуклеацией (зарождением кластеров) и их ростом. Поведение системы в области нуклеации соответствует представлениям Френкеля [2] о наличии гетерофазных флуктуаций в пересыщенном паре, которые приводят к гиббовскому распределению кластеров по размерам. В той же работе найдено, что число димеров в системе существенно выше, чем предсказывается классической теорией, а динамика роста кластеров размера 2 и 3 показывает либо их повышенную стабильность, либо значительную вероятность их столкновений с кластерами больших размеров и дальнейшего поглощения. Эти факты не согласуются с представлениями классической теории нуклеации о механизме формирования критического зародыша и требуют дальнейшего исследования, поэтому целью данной работы является установление кинетических механизмов формирования кластеров малых размеров при нуклеации.

Метод

Моделирование методом молекулярной динамики проводилось в пакете LAMPS [8]. Для МД моделирования использовалась система, состоящая из атомов металла (Cu) и буферного газа (Ar). Взаимодействие атомов Cu описывалось ЕАМ потенциалом [9], учитывающим парные и непарные взаимодействия в металле. Взаимодействия Ar–Ar и Cu–Ar описывались потенциалом типа Леннарда-Джонса. Считалось, что атомы Cu принадлежат одному кластеру, когда расстояние между ними менее 2,7 Å, что на 10 % больше, чем равновесное расстояние в кристаллической меди и на 20 % больше, чем в молекуле Cu₂. Принадлежность атомов кластеру проверялась каждые 5 шагов (0,02 пс) и записывалась в файл для последующего анализа.

Размеры ячейки подбирались для задания начальной плотности металлического пара (0,72–0,09 кг/м³) в расчете на 10 000 атомов металла. Первоначально система перемешивалась при высокой температуре, а затем температура уменьшалась. Дальнейшее регулирование температурного режима осуществлялось только через столкновения с атомами буферного газа, которые постоянно поддерживались при определенной температуре. Такой процесс охлаждения отвечает условиям получения кластеров, когда скрытая теплота отводится только от поверхности кластера посредством столкновения с холодными атомами буферного газа. Нами были изучены модели, буферный газ в которых поддерживался при определенной температуре.

Для задания условий нуклеации и роста кластеров были испробованы 2 режима поддержания числа частиц в системе: постоянное число атомов металла в модельной ячейке и атомы металла добавляются в ячейку по мере образования кластеров. Начальная стадия нуклеации проходит в первом и втором случаях одинаково, однако в первом случае процесс после стадии нуклеации очень быстро выходит на насыщение, когда все атомы металла формируют один или несколько кластеров и дальнейший их рост прекращается. Во втором случае после стадии нуклеации следует стадия роста кластеров за счет газа из мономеров, что является более корректным при описании реального процесса.

Для изучения кинетики формирования кластеров принадлежность каждого атома некоторому кластеру проверялась каждые 5 шагов моделирования (0,02 пс) и записывалась в файл для последующего анализа. Было установлено, что удары (упругие взаимодействия) атомов происходят за 10–20 временных шагов, что составляет 2–3 записи в файле, т.е. нам удалось проследить эволюцию (количество ударов, участие в образовании кластера определенного размера) каждого атома за все время моделирования (около 100 нс).

Результаты

Наблюдение за изменениями размеров кластеров показало, что процесс образования устойчивого кластера происходит через формирование метастабильного кластера с последующей его стабилизацией. В качестве критерия метастабильности использовалось время жизни кластера заданного размера. Метастабильные кластеры постоянно, каждые 15–100 шагов моделирования, циклически меняют свой размер. Т.е. движение молекул в метастабильном кластере напоминает движение системы тел, которые периодически сближаются и удаляются друг от друга, не образуя единого тела устойчивой формы. Метастабильные кластеры имеют существенный избыток энергии, заключенный во внутренних степенях свободы, который после соударения с атомами буферного газа передается в систему, и образуется стабильный кластер, время жизни которого сотни и тысячи временных шагов. На рис. 1 представлены графики суммарного времени жизни стабильных и метастабильных кластеров, появившихся в системе до определенного момента времени. Число кластеров в системе может быть получено посредством операции дифференцирования. На графике приведены интегральные характеристики, т.к. их использование позволяет избавиться от статистических ошибок и получить более достоверную информацию.

Сравнение данных рис. 1 и результатов работы [7] показывает, что избыток димеров в системе – неточность, заключенная в статическом рассмотрении состояния системы. При статическом рассмотрении, которое было использовано в работе [7], положение атомов фиксируется через значительные промежутки времени и может оказаться, что в этот момент времени части метастабильного кластера находятся на расстоянии большем, чем длина связи и они рассматриваются как отдельные кластеры. Это приводит к завышенным значениям числа димеров при подсчетах. На самом деле, стабильные и метастабильные димеры в системе – часть более крупных метастабильных формирований, и они являются основным «строительным материалом» кластеров. Осо-

бенно наглядно это видно из того, что количество метастабильных димеров в системе крайне мало, т.е. метастабильный димер достаточно быстро стабилизируется или распадается. Как видно из рис. 1, основными формированиями в системе являются метастабильные и стабильные тримеры. По видимому, это связано с тем, что при соударениях тример может «обмениваться» атомами с паром, оставаясь тримером.

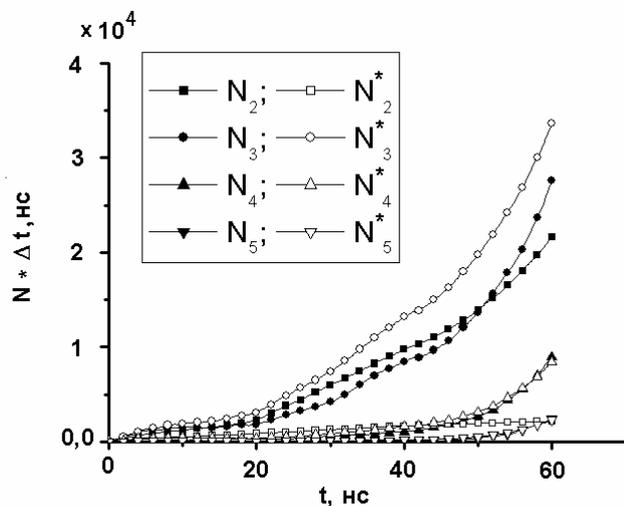


Рис. 1. Суммарное время жизни стабильных N_x и метастабильных N_x^* кластеров размера x , появившихся в системе до определенного момента времени ($T = 750 \text{ K}$, $\rho = 0,39$)

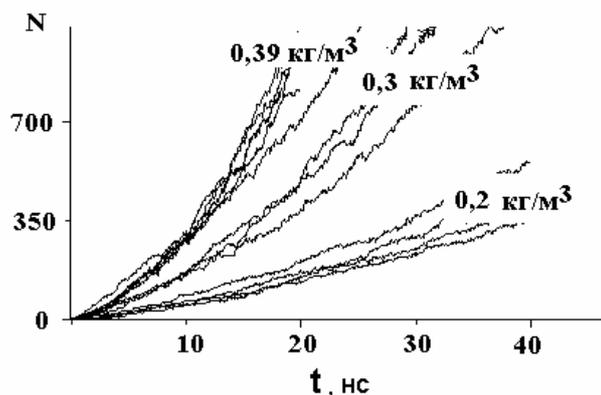


Рис. 2. Количество стабильных димеров в моделях различных плотностей и температур в зависимости от времени моделирования. Серии кривых – различные температуры

Особое место в процессе роста кластеров занимают метастабильные и стабильные димеры. Дело в том, что для образования метастабильного димера необходимо присутствие третьего атома (металла или газа), которому отдается избыток энергии. Считается, что это может стать сдерживающим фактором конденсации. На рис. 2 показана зависимость количества стабильных димеров от времени моделирования при различных условиях в системе. Можно заметить, что основным фактором, влияющим на образование стабильных димеров, является плотность первоначального металлического пара. В процессе моделирования было выявлено, что количество метастабильных димеров в системе примерно постоянно, т.е. процесс образования метастабильных димеров и их стабилизация могут определять скорость протекания начальной стадии нуклеации.

Нужно отметить, что кластеры малого размера формируются посредством сложных столкновений (тройных столкновений или столкновений типа кластер – кластер), когда часть энергии удаляется вместе с отделяющимися атомами. Кластеры большого размера, напротив, могут расти посредством простых взаимодействий (присоединение мономера или присоединение малого кластера), т.к. избыток энергии может перераспределиться по внутренним степеням свободы кластера без нарушения его целостности. По-видимому, это обстоятельство определяет минимальный размер устойчивого кластера, т.е. критического зародыша.

Выводы

Процесс формирования кластеров при конденсации не может быть описан на основе изучения набора статических данных о расположении атомов. В этом случае необходимо учитывать движение атомов на значительном интервале времени, т.е. анализировать кинетику формирования кластеров, учитывающую столкновения, образования метастабильных кластеров и процесса стабилизации кластера посредством столкновений с более «холодными» атомами. Найдено, что стабильные и метастабильные димеры и тримеры являются основными формированиями, определяющими протекание гомогенной нуклеации в газе.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проект № 09-03-00069-а, 10-07-96001-р_урал_а.

Литература

1. Becker, R. The kinetic treatment of nuclear formation in supersaturated vapors / R. Becker, W. Doring // *Ann. Phys.* – 1935. – V. 24. – P. 719.
2. Френкель, Я.И. Кинетическая теория жидкостей: Собр. избр. тр. / Я.И. Френкель – М.: Изд-во АН СССР, 1959. – Т. 3. – 460 с.
3. Зельдович, Я.Б. Теория образования новой фазы. Кавитация / Я.Б. Зельдович // *Журнал экспериментальной и теоретической физики.* – 1942. – Т. 12. – С. 525–538.
4. Thompson, S.M. A molecular dynamics study of liquid drops / S.M. Thompson, K.E. Gubbins, J. Walton *et al* // *The Journal of Chemical Physics.* – 1984. – V. 81. – P. 530.
5. Zhukhovitskii, D.I. Molecular dynamics study of cluster evolution in supersaturated vapor / D.I. Zhukhovitskii // *The Journal of Chemical Physics.* – 1995. – V. 103. – P. 9401.
6. Yasuoka, K. Molecular dynamics of homogeneous nucleation in the vapor phase. I. Lennard-Jones fluid / K. Yasuoka, M. Matsumoto // *The Journal of Chemical Physics.* – 1998. – V. 109. – P. 8451.
7. Воронцов, А.Г. // Моделирование зарождения и роста металлических наночастиц в процессе конденсации из пересыщенного пара / А.Г. Воронцов // *Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика».* – 2009. – Вып. 1. – № 9(185). – С. 39–44.
8. Plimpton, S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics / S.J. Plimpton // *J. Comp. Phys.* – 1995. – V. 117. – P. 1. (<http://lammps.sandia.gov/index.html>)
9. 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.

Поступила в редакцию 4 октября 2010 г.

**ON PECULIARITIES OF MODELING OF CONDENSATION
BY MOLECULAR DYNAMICS METHODS**

Kinetics of nucleation process was studied by molecular dynamic simulation. The formation of cluster is found to be a two step process. The first step is the formation of a metastable cluster with excess energy. The second step is the stabilization of the cluster during the energy loss with elastic collisions with the inert gas atoms. The necessity of kinetics was shown.

Keywords: metal nanoparticles, condensation, computer simulation.

Vorontsov Alexander Gennadevich is Cand.Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

Воронцов Александр Геннадьевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедры общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: sas@physics.susu.ac.ru

ТОПОЛОГИЧЕСКИЕ СОЛИТОНЫ В ОДНОРОДНОЙ АСИММЕТРИЧНОЙ МОДЕЛИ МОЛЕКУЛЫ ДНК

Ф.К. Закирьянов, С.Р. Хамзин

Рассмотрена математическая модель нелинейной динамики однородной, но асимметричной по основаниям искусственной молекулы ДНК. Получены солитонные решения, описывающие конформационные изменения в процессе функционирования ДНК. Исследовано влияние диссипации на динамику солитонов. Рассмотрено прохождение солитонов через границы однородных областей в искусственных последовательностях ДНК, приводящие к изменению топологии солитонов.

Ключевые слова: ДНК, нелинейная динамика, топологические солитоны.

Развитие современной нелинейной физики привело к открытию новых элементарных механизмов, определяющих на молекулярном уровне протекание многих физических процессов в кристаллах, полимерных цепях, молекулах ДНК и других упорядоченных молекулярных системах. Развитие теории и практики вычислительного эксперимента позволяет исследовать динамику молекулярных систем, состоящих из большого числа частиц с большим выбором параметров и разнообразных условий, имитирующих реальные свойства систем. Большой интерес в связи с этим вызывает моделирование динамики ДНК с учетом ее гетерогенности и асимметрии по основаниям, что недоступно на нынешнем уровне развития науки аналитическим методом.

В работе [1] изучена динамика солитонов в молекуле ДНК, подробно описана численная схема метода исследования движения солитонов вдоль цепи двойной спирали ДНК. В этой работе для упрощения вычислений авторы сосредоточились только на вращательных движениях азотистых оснований вокруг сахаро-фосфатных цепей в плоскости, перпендикулярной главной оси двойной цепочки. Были найдены решения в виде уединенных волн (солитонов), описывающих открытое состояние пар оснований в ДНК; полученные решения классифицированы. Наряду с этим рассматривались устойчивость солитонов к большим тепловым колебаниям, взаимодействие между солитонами и взаимодействие солитонов с неоднородностями цепи. Для решения этих задач авторы использовали метод, эффективность которого была проверена в работах [2–4], где он использовался для анализа нелинейной динамики молекулярных цепей и полимерных кристаллов. Следует отметить, что, как было показано в цитируемых работах, солитоны могут двигаться на всем протяжении макромолекулы с постоянной скоростью, меньшей скорости звука в рассматриваемой среде.

Целью данной работы является исследование влияния гетерогенности модели ДНК на условия зарождения и прохождения нелинейных уединенных волн.

В работе рассматривается дискретная модель В-формы молекулы ДНК, на рис. 1 схематически представлена часть данной модели. Белые и черные прямоугольники соответствуют парам оснований АТ или GC, а линии – скелету двойной спирали.

Плоская модель ДНК представляет две параллельные цепочки, расстояние между которыми равно h . Для удобства описания модели левой цепи будем приписывать индекс 1, а правой 2. В этой модели основания совершают вращение вокруг сахаро-фосфатного остова и всегда остаются перпендикулярными ему и соответственно этому: $\varphi_{n,1}$ – угловое перемещение n -го основания первой цепочки, $\varphi_{n,2}$ – угловое перемещение n -го основания второй цепочки. Гамильтониан для двойной цепи имеет вид

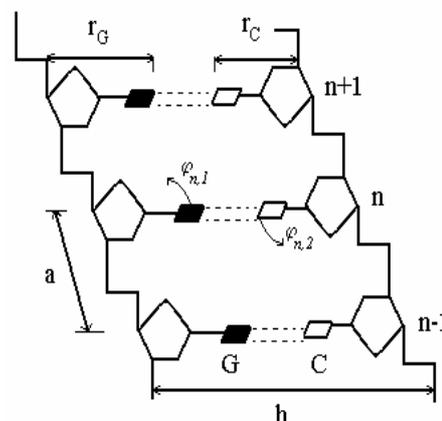


Рис. 1. Фрагмент двойной спирали ДНК, состоящей из трех пар оснований вида GC или (AT). Расстояние между основаниями вдоль цепи $a = 3,4$ Å, расстояние между цепями $h = 16,15$ Å [3, 4]

$$H = \sum_n \left[\frac{1}{2} I_{n,1} \dot{\varphi}_{n,1}^2 + \frac{1}{2} I_{n,2} \dot{\varphi}_{n,2}^2 + \varepsilon_{n,1} \sin^2 \frac{\varphi_{n+1,1} - \varphi_{n,1}}{2} + \varepsilon_{n,2} \sin^2 \frac{\varphi_{n+1,2} - \varphi_{n,2}}{2} + V_{\alpha\beta}(\varphi_{n,1}, \varphi_{n,2}) \right]. \quad (1)$$

Опишем слагаемые, входящие в гамильтониан (1): первое и второе слагаемые описывают кинетическую энергию n -х пар основания ($I_{n,1}$ – момент инерции n -го основания первой цепи; $I_{n,2}$ – момент инерции n -го основания второй цепи, точкой обозначено дифференцирование по времени t). За взаимодействие соседних пар оснований вдоль цепочек отвечают третий и четвертый член в гамильтониане (1). Здесь параметр $\varepsilon_{n,i}$ характеризует энергию взаимодействия n -го основания с $(n + 1)$ -м основанием i -й цепи ($i = 1, 2$). Параметр, характеризующий энергию взаимодействия, предположительно должен быть больше 60 кДж/моль в связи с тем, что угловое вращение оснований сопровождается преодолением барьера стеклинг-взаимодействия и деформацией двугранных и валентных углов. Пятое слагаемое гамильтониана (1) описывает энергию взаимодействия между связанными парами оснований цепочек (всего имеем четыре типа пар оснований $\alpha\beta = AT, TA, CG, GC$). В качестве потенциала взаимодействия возьмем потенциал вида

$$V_{\alpha\beta}(\varphi_{n,1}, \varphi_{n,2}) = K_{\alpha\beta} \{ r_{\alpha} (r_{\alpha} + r_{\beta}) (1 - \cos \varphi_{n,1}) + r_{\beta} (r_{\alpha} + r_{\beta}) (1 - \cos \varphi_{n,2}) - \frac{1}{4} \left(1 - \frac{\omega_{\alpha\beta 2}}{\omega_{\alpha\beta 1}} \right) (r_{\alpha} + r_{\beta})^2 [1 - \cos(\varphi_{n,1} - \varphi_{n,2})] \},$$

где $K_{\alpha\beta}$ – константа потенциала взаимодействия, $\omega_{\alpha\beta 1}$, $\omega_{\alpha\beta 2}$ – частоты вращательных колебаний оснований при движении в одном и в противоположных направлениях (22 и 81,5 см⁻¹ [1, 4]) соответственно.

В основе численного метода поиска солитонного решения лежит нахождение условного минимума для лагранжиана системы с соответствующими граничными условиями [1, 5]:

$$\begin{aligned} \varphi_{1,1} &= \varphi_{-\infty,1}, \quad \varphi_{1,2} = \varphi_{-\infty,2}, \\ \varphi_{N,1} &= \varphi_{\infty,1}, \quad \varphi_{N,2} = \varphi_{\infty,2}. \end{aligned}$$

Найденные точки минимума служат начальными точками для решения системы уравнений движения:

$$\begin{aligned} I_{n,1} \frac{d^2 \varphi_{n,1}}{dt^2} &= - \frac{\partial H(\varphi_{n,1}, \varphi_{n,2})}{\partial \varphi_{n,1}}, \\ I_{n,2} \frac{d^2 \varphi_{n,2}}{dt^2} &= - \frac{\partial H(\varphi_{n,1}, \varphi_{n,2})}{\partial \varphi_{n,2}}. \end{aligned} \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots)$$

Модель учитывает также диссипацию в системе вследствие взаимодействия молекулы ДНК с водным окружением. Интегрирование уравнений движения проводилось с помощью неявного метода Розенброка 2-го порядка точности.

Известно, что для нелинейных волновых уравнений решения в виде бегущих волн требуют начальных условий специального вида, а именно, в виде самих этих решений в начальный момент времени. Для реальных систем не менее важно знать, что происходит при достаточно произвольных решениях. Очевидно, что это может быть исследовано только численно. Рассмотрим динамику уединенных волн в случае, когда начальное импульсное возбуждение задается в произвольном месте двойной цепочки. Первое импульсное возбуждение возьмем в виде

$$\varphi_{n,i} = \frac{1}{\cosh(\mu(n-f))} \pi q_i, \quad i = 1, 2,$$

где f – параметр, который задает точку приложения начального возбуждения (зависит от n).

В таком виде данное возбуждение быстро затухает со временем, но если амплитуду возмущения увеличить в два раза, то при определенных значениях параметров (в т.ч. начальной скорости уединенной волны) данное возбуждение становится устойчивым 2π -кинком. Другими словами, это «колоколообразное» возмущение переходит в «кинкоподобное» возбуждение $\varphi_{n,i} = [1 + \text{th} \mu(n - N/2)] \pi q_i$ (рис. 2). В случае, когда амплитуда возмущения велика (множитель

$m\pi q_i$ ($m > 2$), возбуждение со временем *всегда* становится стационарным и принимает вид 2π -кинка.

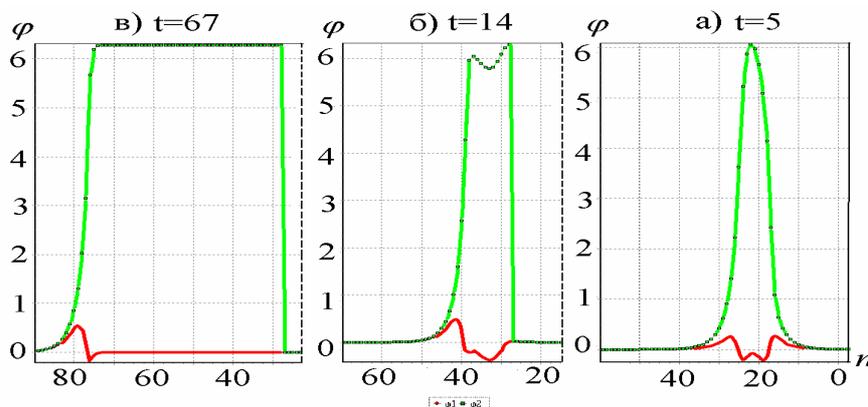


Рис. 2. Динамика возбуждения и прохождения по цепи уединенной волны топологии $q=(0,1)$. Солитон движется справа налево. Здесь и далее значения углов поворота представлены в радианной мере

В качестве начального возбуждения нами были рассмотрены еще два колоколообразных профиля для уединенных волн:

$$\varphi_{n,i} = \frac{1}{(1 + e^{-\mu(n-f)})} q_i, \quad \varphi_{n,i} = \frac{1}{(1 + (\mu(n-f))^2)} q_i, \quad i = 1, 2.$$

Расчеты показали, что со временем оба эти возбуждения затухают, то есть в данной модели двойной спирали ДНК не могут существовать волны с таким профилем. С увеличением амплитуды этих начальных возмущений они ведут себя аналогично рассмотренному выше. Таким образом, в рамках данной модели уединенные волны можно возбуждать не только задавая «кинковые» начальные условия, но и начальные условия в виде «колоколообразных» импульсов.

Солитонное решение задачи можно охарактеризовать топологическим зарядом $q = (q_1, q_2)$, где $q_i = (\varphi_{\infty,i} - \varphi_{-\infty,i})/2\pi$ ($i = 1, 2$) является целым числом ($q_i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$). Для нахождения солитонного решения с топологическим зарядом q нужно решить задачу на минимум лагранжиана с граничными условиями:

$$\varphi_{-\infty,1} = \varphi_{-\infty,2} = 0, \quad \varphi_{\infty,1} = 2\pi q_1, \quad \varphi_{\infty,2} = 2\pi q_2.$$

В ходе численного исследования удалось установить, что в данной модели молекулы ДНК могут существовать *семь* типов топологических солитонов $q = (1, 0), (0, 1), (-1, 0), (0, -1), (1, 1), (-1, 1), (1, -1)$, некоторые из которых представлены на рис. 3. В рассматриваемом диапазоне дозвуковых скоростей аналогичные результаты получены в работах [1, 5–7].

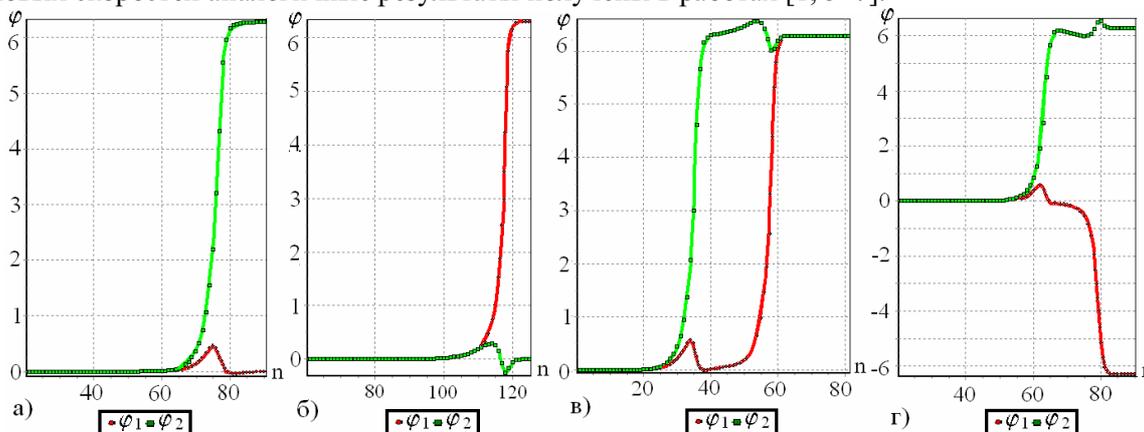


Рис. 3. Вид стационарных солитонов с топологическими зарядами: а) $q = (0,1)$, б) $q = (1,0)$, в) $q = (1,1)$, г) $q = (-1,1)$. Сдвиг солитонов обусловлен разницей в энергиях взаимодействия оснований в комплементарных цепочках

Далее нами была исследована зависимость энергии солитонов от коэффициента диссипации (рис. 4, 6) и скорости солитонов (рис. 5, 7). В качестве последовательности пар азотистых осно-

ваний в модели ДНК, была взята *искусственная* последовательность типа AT-GC-TA-CG-AT-GC-TA-CG и т.д.

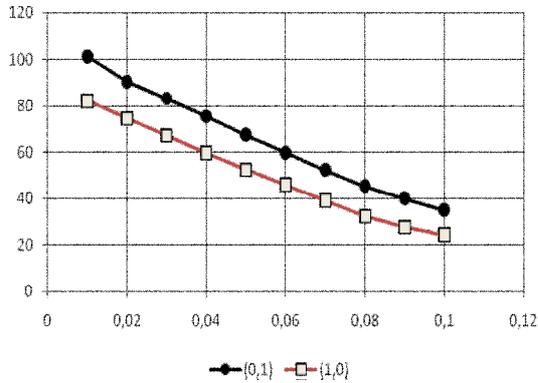


Рис. 4. Зависимости безразмерной энергии топологических солитонов $q = (0, 1)$, $q = (1, 0)$ от коэффициента диссипации

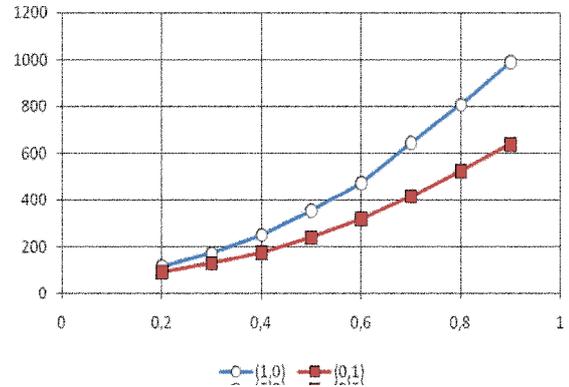


Рис. 5. Зависимости безразмерной энергии топологических солитонов $q = (1, 0)$ и $q = (0, 1)$ от безразмерной скорости (s)

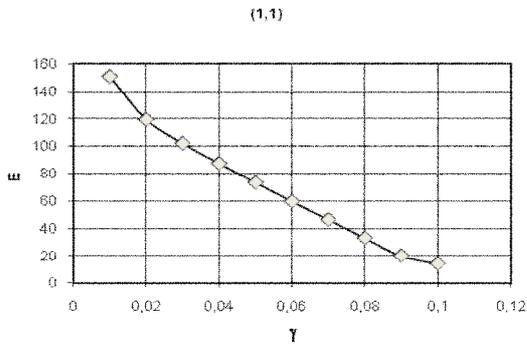


Рис. 6. Зависимость безразмерной энергии топологического солитона (1, 1) от коэффициента диссипации

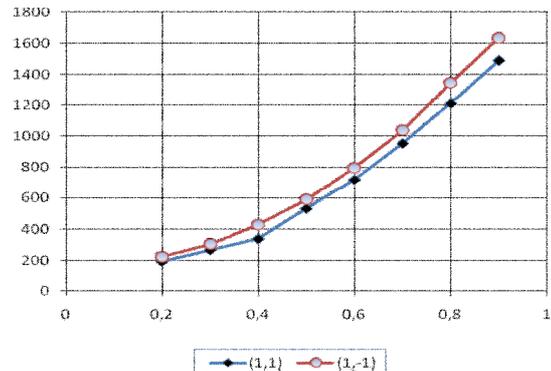


Рис. 7. Зависимости безразмерной энергии топологических солитонов (1, 1) и (1, -1) от безразмерной скорости (s)

Также в качестве реальной последовательности оснований в молекуле ДНК был рассмотрен геном $T7A_1$ в количестве 169 оснований. Последовательность оснований $T7A_1$ представлена ниже.

TTGTCSTTTATTAATACAACCTCACTATAAGGAGAGACAACSTTAA
AGAGACT₅₀TAAAAAGATTAATTTAAAAATTTATCAAAAAGAGTATTG
ACTTAAACTCTAA₁₀₀CCTATAGGATACTTACAGCCATCGAGAGGG
ACACGGCGGAATAGCCATCC₁₅₀CAATCGACACCGGGGTCAA

На данной последовательности оснований были получены следующие результаты (рис. 8–10).

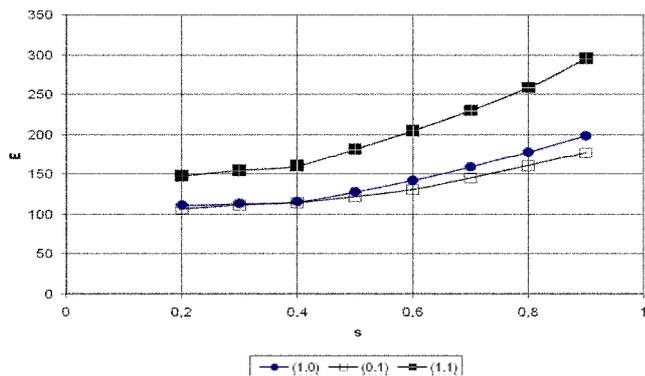


Рис. 8. Зависимости безразмерной энергии солитонов от безразмерной скорости (s) для $T7A_1$

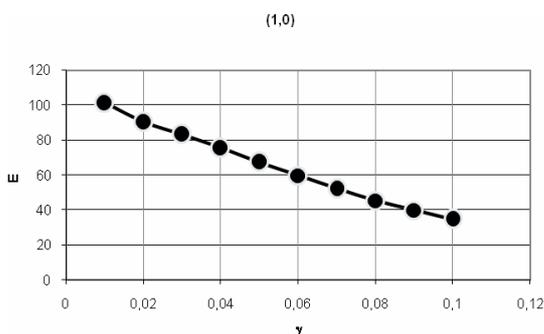


Рис. 9. Зависимость безразмерной энергии топологического солитона (0, 1) от коэффициента диссипации для $T7A_1$

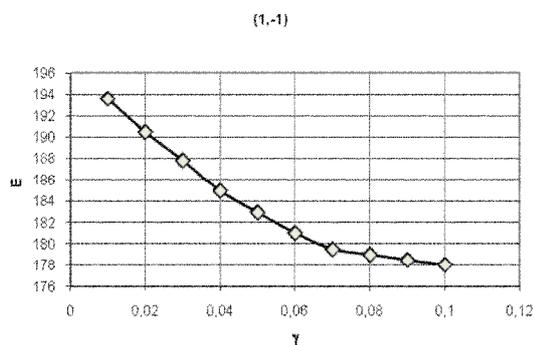


Рис. 10. Зависимость безразмерной энергии топологического солитона (1, -1) от коэффициента диссипации для $T7A_1$

Как и можно ожидать, в нашей модели энергия топологического солитона экспоненциально уменьшается с увеличением коэффициента вязкости. При больших значениях коэффициента диссипации (больше 0,1) происходит потеря энергии солитона со временем, пока она не достигнет близких к нулю значений.

Далее нами было рассмотрено прохождение солитонов через границу, разделяющую две однородные области. Мы составили модель молекулы ДНК таким образом, что половина цепи состоит из пар АТ-оснований, а вторая половина – из GC-оснований. В ходе численного эксперимента было установлено, что при переходе солитона из одной части (АТ) цепи в другую её часть (GC) изменяется энергия солитона. Например, при скорости солитона $s = 500$ (здесь и далее параметры заданы в безразмерных единицах), параметре кооперативности [1] $g = 30$, топологии $q = (1, 0)$, при переходе АТ→GC энергия изменилась: $89,42(АТ) - 76,03(GC) = 13,39$; для топологии $(1, -1)$ при тех же параметрах: $172,79(АТ) - 147,51(GC) = 25,28$. Отсюда видно, что при переходе солитона АТ→GC его энергия уменьшается, а при переходе GC→АТ энергия увеличивается. Объясняется это тем, что между парами GC имеется три водородные связи, а между парами АТ – две.

В ходе численного эксперимента удалось также установить минимальную скорость прохождения солитона по цепочке, так чтобы в той части цепи, где в качестве пар азотистых оснований были выбраны пары GC, волновое возбуждение не затухало, а в части цепи с парами АТ – волна затухала. Для топологии $q = (1, 0)$ диапазон скоростей, при которых происходит затухание уединенной волны, равен от $s = 300$ до $s = 1980$ при следующих параметрах: $g = 21, K = 0,234, \gamma = 0, n = 800$ (переход АТ→GC) (рис. 11); для топологии $q = (0, 1)$ при скоростях $s = 300$ при следующих параметрах: $g = 18,36, K = 0,234, \gamma = 0, n = 800$ (переход GC→АТ) (рис. 12).

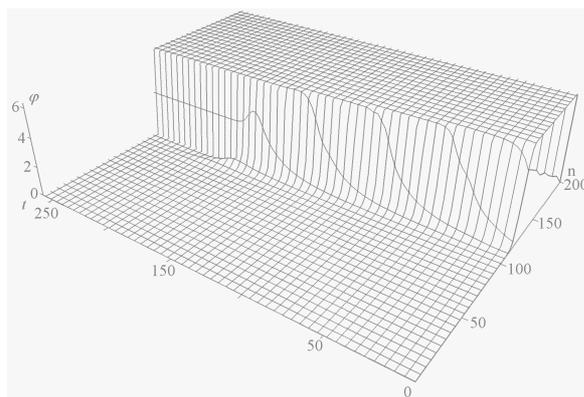


Рис. 11. Прохождение топологического солитона (1,0) через границу области между двумя различными парами азотистых оснований. Граница раздела находится на 100-м узле цепи

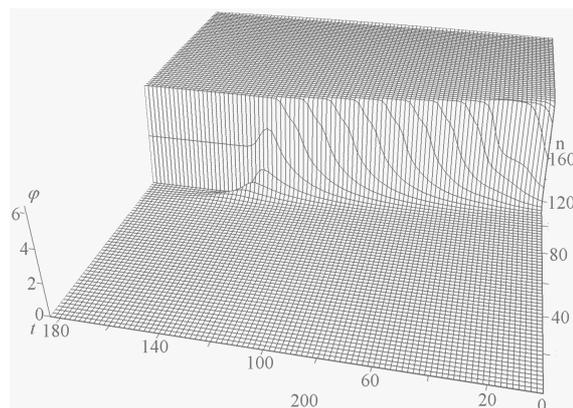


Рис. 12. Прохождение топологического солитона (0,1) через границу области между двумя различными парами азотистых оснований. Граница раздела находится на 100-м узле цепи

При исследовании солитонов топологии $q = (1, 1)$ было получено следующее: при скоростях $s = 300 \dots 500$ и $g = 20$ в части с основаниями АТ кинки движутся вместе без сдвига (сдвиг показан на рис. 3,в), а в части с парами оснований GC топология $q = (1, 1)$ переходит в топологию $q = (0, 1)$, то есть в одной из цепочек (с основаниями G) уединенная волна затухает. Энергия солитона в части с основаниями АТ равна $E_{(1,1)\text{-AT}} = 110,19$, затем при переходе из части с основаниями АТ в часть с основаниями GC энергия увеличивается до $E_{(1,1)\text{AT} \rightarrow \text{GC}} = 170,39$, со временем, когда кинк в первой цепочке затухает и солитон приобретает топологию $q = (0, 1)$, энергия равна $E_{(1,1)\text{-GC}} = 112,15$ (при следующих параметрах: $s = 300, g = 20$). Если же мы рассмотрим солитон только с топологией $q = (0,1)$ в части с основанием GC при тех же параметрах, то его энергия равна $E_{(0,1)\text{-GC}} = 77,42$.

В случае с топологией $q = (1, -1)$ при скоростях $s = 300 \dots 500$ и $g = 21$ переходе АТ \rightarrow GC кинк в первой цепочке затухает и в итоге возбуждение приобретает топологию $q = (0, -1)$. При возбуждении уединенной волны в АТ со временем происходит отрыв кинка во второй цепочке от кинка в первой цепочке, энергия всей волны равна $E_{(1,-1)\text{-AT}} = 143,47$. На момент перехода кинком во второй цепочке границы между однородными областями энергия волны равна $E_{(1,-1)} = 154,52$, а когда границы достигает кинк в первой цепочке и затухает (прямо на границе раздела) энергия солитона становится равной $E_{(1,-1)\text{-GC}} = 115,22$. В то же время, если рассмотрим энергию кинка $q = (0, -1)$, который движется только во второй цепочке в части с основаниями GC, при тех же параметрах его энергия будет равна $E_{(0,-1)\text{-GC}} = 79,04$.

На рис. 13 и 14 представлены графики прохождения солитонов с топологиями $q = (1, 1)$ и $q = (1, -1)$ через границу однородных областей. Видно, что кинки в первых цепочках при прохождении 100-го узла (границы) затухают, а в комплементарных цепочках кинки проходят границу беспрепятственно. В итоге топология солитона меняется.

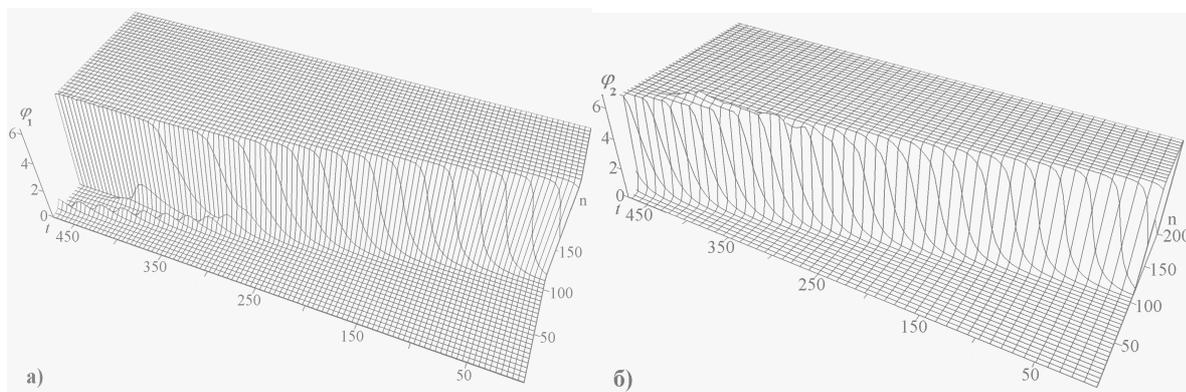


Рис. 13. Прохождение топологического солитона $q = (1, 1)$ через границу области между двумя различными парами азотистых оснований. Граница раздела находится на 100-м узле цепи: а) кинк в первой цепочке, б) кинк во второй цепочке

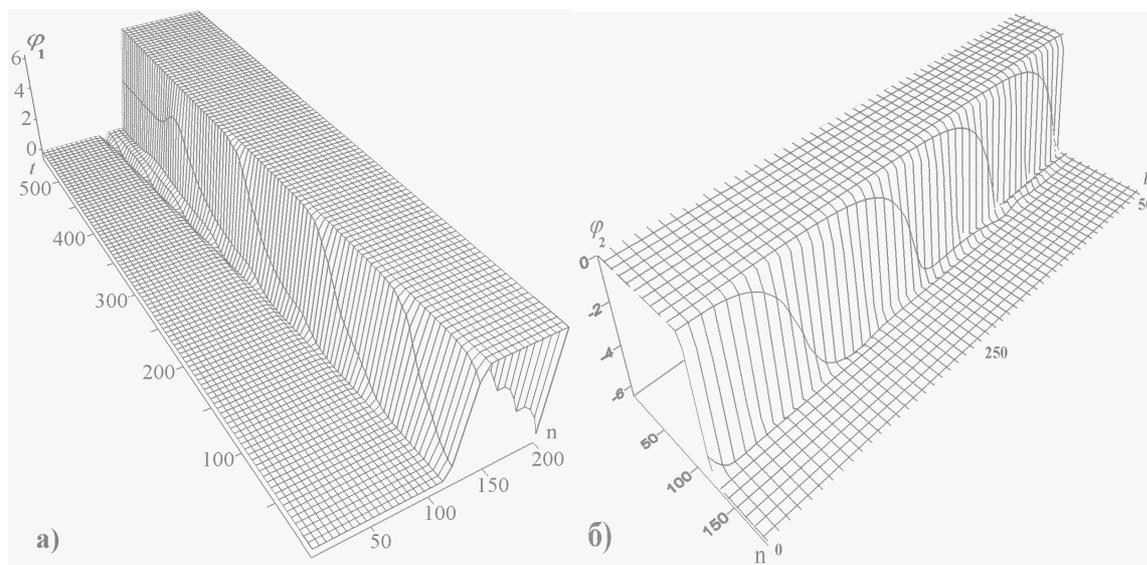


Рис. 14. Прохождение топологического солитона $q = (1, -1)$ через границу области между двумя различными парами азотистых оснований. Граница раздела находится на 100-м узле цепи; а) кинк в первой цепочке, б) кинк во второй цепочке

Итак, в настоящей работе рассмотрена модель, учитывающая неоднородность распределения пар азотистых оснований (рассматривались различные типы чередования оснований в цепи), а также рассмотрена последовательность, соответствующая реальной последовательности в геноме бактериофага T7A1. Рассмотрена динамика уединенных волн в случае, когда начальное импульсное возбуждение задается в любом месте двойной цепи. Показано, что солитонная динамика возможна и в случае колоколообразных начальных импульсов. Была исследована динамика топологических солитонов в зависимости от параметров цепи и скорости волны в макромолекуле. Исследована зависимость энергии топологических солитонов от безразмерной скорости s (рассматривался только дозвуковой диапазон скоростей) – с ростом скорости энергия солитона увеличивается. Полученные результаты качественно аналогичны результатам, полученным ранее на однородных цепочках, с соответствующими количественными отклонениями, объясняемыми различиями в энергиях взаимодействия разных пар оснований [6–8]. Для неоднородных двухцепочечных моделей рассмотрено влияние диссипации на динамику солитонов. Показано, что энергия солитона экспоненциально уменьшается с ростом коэффициента диссипации γ . При достаточно больших значениях γ происходит потеря энергии солитона до нуля. Была изучена динамика прохождения уединенной волны через границу между двумя различными парами оснований. Показано, что при этом может меняться топология солитонов.

Литература

1. Yakushevich, L.V. Nonlinear dynamics of topological solitons in DNA / L.V. Yakushevich, A.V. Savin, L.I. Manevitch // *Physical Review*. – 2002. – E. 66. – P. 016614-1–016614-6.
2. Twisted topological solitons and dislocations in polymer crystal / A.V. Savin, J.M. Khalack, P.L. Christiansen, A.V. Zolotaryuk // *Physical Review B*. – 2002. – V. 65. – P. 054106-1–054106-10.
3. Savin, A.V. Topological solitons in spiral polymeric macromolecules: A chain surrounded by immovable neighbors / A.V. Savin, L.I. Manevitch // *Physical Review B*. – 2001. – V. 63. – P. 224303-1–224303-13.
4. Савин, А.В. Динамика топологических солитонов в системе слабосвязанных цепей / А.В. Савин, Е.А. Зубова, Л.И. Маневич // *ВМС, серия А*. – 2005. – Т. 47, № 4. – С. 637–651.
5. Топологические солитоны в неоднородной молекуле ДНК / Н.А. Ковалева, А.В. Савин, Л.И. Маневич и др. // *ВМС, серия А*. – 2006. – Т. 48, № 3. – С. 454–471.
6. Хамзин, С.Р. Численное исследование нелинейных уединенных волн в молекулярных цепочках методом молекулярной динамики / С.Р. Хамзин // *Всероссийская школа-конференция для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании»: сб. науч. тр.* – Т. 3: Физика. – 2008. – С. 300–303.

7. Хамзин, С.Р. Численное исследование нелинейных уединенных волн в модели молекулы ДНК / С.Р. Хамзин // Всероссийская школа-конференция для студентов, аспирантов и молодых ученых «Фундаментальная математика и ее приложения в естествознании»: тезисы докладов, Физика. – 2007. – С. 42.

8. Закирьянов, Ф.К. Топологические солитоны в двухцепочечной модели ДНК / Ф.К. Закирьянов, С.Р. Хамзин, К.Р. Юлмухаметов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика, физика, химия». – 2009. – Вып. 12. – № 10 (143). – С. 8–14.

Поступила в редакцию 22 марта 2010 г.

TOPOLOGICAL SOLITONS IN THE HOMOGENEOUS ASYMMETRIC MODEL OF A DNA MOLECULE

The mathematical model of the nonlinear dynamics of homogeneous asymmetric model of a DNA artificial molecule is considered. Solitonic solutions describing conformation changes in processes of functioning of DNA are obtained. Influence of dissipation on soliton dynamics is researched. It is shown that soliton propagation through the borders of homogeneous areas in artificial sequences of DNA leads to changes in soliton topology.

Keywords: DNA, nonlinear dynamics, topological solitons.

Zakiryaynov Farit Kabirovich is an associate professor of the Theoretical Physics Department of Bashkir State University.

Закирьянов Фарит Кабирович – доцент кафедры теоретической физики Башкирского государственного университета.

e-mail: farni@rambler.ru

Khamzin Salavat Rifovich is a post-graduate student of the Theoretical Physics Department of Bashkir State University.

Хамзин Салават Рифович – аспирант кафедры теоретической физики Башкирского государственного университета.

e-mail: ShKlim@yandex.ru

ФОТОВОЛЬТАИЧЕСКИЕ И ФОТОРЕФРАКТИВНЫЕ ЭФФЕКТЫ В КРИСТАЛЛАХ СО СТРУКТУРОЙ СЕЛЕНИТА

Б.Х. Каримов

Обнаружен и исследован фотовольтаический эффект в кристаллах со структурой селенита. Определен фотовольтаический коэффициент $K_{14} = 2 \cdot 10^{-10} \text{ А} \cdot \text{см} \cdot (\text{Вт})^{-1}$ при температуре 133 К при освещении светом с длиной волны $\lambda = 500 \text{ нм}$ для $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$. Обсуждены некоторые экспериментальные и физические основы фотовольтаического эффекта в кристаллах со структурой селенита. Исследование показывает, фотовольтаический эффект должен возникать и в других кристаллах со структурой селенита.

Показана возможность использование фотопьезоэлектриков со структурой селенита в голографической записи.

Ключевые слова: фотовольтаический эффект, фотовольтаический коэффициент, фотопьезоэлектрик, кристаллы со структурой селенита.

Введение

В термодинамически неравновесных условиях возможны токи иной природы, обусловленные отсутствием в среде центра симметрии. Важнейшим эффектом этого класса является аномальный фотовольтаический эффект (АФ эффект).

АФ эффект заключается в том, что при равномерном освещении короткозамкнутого сегнетоэлектрика через него протекает стационарный ток, который в [1, 2] был назван фотовольтаическим. Было показано, что именно фотовольтаический ток приводит к аномальному фотовольтаическому эффекту в сегнетоэлектриках.

Эксперименты показывают, что при стационарном однородном освещении однородных кристаллов возникает стационарный ток, зависящий от степени (состояния) поляризации света. Поэтому его в настоящее время называют линейным фотовольтаическим эффектом. Эти явления по своей физической природе сильно отличаются от классических фотогальванических эффектов, таких как эффект Дембера, вентильный эффект, эффект Кикоина–Носкова, которые описываются термализованными носителями тока, энергия у которых меньше чем $3k_B T/2$, где T – температура образца, k_B – постоянная Больцмана. Поляризационные фотогальванические эффекты, наоборот, описываются нетермализованными носителями тока. Последние эффекты иногда называют горячими носителями тока.

Аномальный фотовольтаический эффект, обнаруженный для сегнетоэлектриков впервые в [1, 2], является частным случаем АФ эффекта, описываемого для кристаллов без центра симметрии тензором третьего ранга α_{ijk} [2, 3]:

$$J_i = \alpha_{ijk} E_j E_k^* \quad (1)$$

Согласно (1) при равномерном освещении линейно поляризованным светом однородного кристалла без центра симметрии (сегнето-, пиро- или пьезоэлектрического кристалла) в нем возникает фотовольтаический ток J_i , знак и величина которого зависят от ориентации вектора поляризации света с проекциями E_j, E_k^* .

Компоненты тензора α_{ijk} отличны от нуля для 20 ацентричных групп симметрии. Если электрода кристалла разомкнуть, то фотовольтаический ток J_i генерирует фотонапряжение

$$U_i = \frac{J_i}{\sigma_T + \sigma_\phi} l, \text{ где } \sigma_T \text{ и } \sigma_\phi \text{ – темновая и фотопроводимость соответственно, } l \text{ – расстояние}$$

между электродами. В кристаллах без центра симметрии генерируемые фотонапряжения порядка 10^3 – 10^5 В. Например, генерируемое фотонапряжение в сегнетоэлектриках LiNbO_3 достигает до 10^5 В. В соответствии с (1) и симметрией точечной группы кристалла можно написать выражения для фотовольтаического тока J_i . Сравнение экспериментальной угловой зависимости $J_i(\beta)$ с

(1) позволяет определить фотовольтаический тензор α_{ijk} или фотовольтаический коэффициент

$$K_{ijk} = \frac{1}{\alpha^*} \alpha_{ijk} \quad (\alpha^* - \text{коэффициент поглощения света}).$$

В работе изложены результаты исследования объемного фотовольтаического эффекта и оптическая запись в кристаллах со структурой селенита, принадлежащих к кубической точечной группе 23.

1. АФ эффект в кубическом фотопьезоэлектрике со структурой селенита

Сложные кислородные соединения висмута типа $(m\text{Bi}_2\text{O}_3 \dots n\text{Me}_x\text{O}_y)$ последнее время вызывают большой интерес. Они обычно являются пьезоэлектриками, а наличие фотопроводимости в сочетании с электрооптическими свойствами выдвигает их в число перспективных материалов для использования в элементах оптической памяти. Электрооптические кристаллы со структурой селенита $\text{Bi}_{12}\text{MO}_{20}$ ($M = \text{Si}, \text{Ge}, \text{Ti}$) имеют удачную комбинацию электрооптических, акустооптических и пьезоэлектрических свойств, которые делают их многообещающим материалом для оптоэлектроники. Сильная спектральная зависимость оптических свойств этих кристаллов и их электрооптических свойств делает возможным создавать разнообразные устройства, такие как пространственные легкие модуляторы, записывающие устройства для голограммы, оптические конвертеры и т.д. Относительно большой электрооптический эффект селенитов делает их полезными также для волоконной оптики электрическими полевыми датчиками с высокой термостабилизацией.

Основные характеристики электрооптических кристаллов со структурой селенита представлены в таблице.

Как было показано, в отличие от сегнетоэлектриков [1, 2] фотовольтаический эффект в фотопьезоэлектрических кристаллах можно наблюдать только в поляризованном свете [5, 6]. В [8] наблюдался фотовольтаический эффект в кубическом фотопьезоэлектрике $\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$, для которого была измерена единственная отличная от нуля компонента фотовольтаического тензора $K_{14} = 2 \cdot 10^{-9} \text{А} \cdot \text{см} \cdot (\text{Вт})^{-1}$ (при комнатной температуре).

Измерения проводились в лаборатории гидротермального синтеза в Институте кристаллографии Российской академии наук [4]. Использовался выращенный гидротермальным методом кристалл окиси титаната висмута, в который специально вводились примеси. Кубический кристалл $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ принадлежит к точечной группе 23.

Электрические, электрооптические и фотоэлектрические свойства кристаллов $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ исследовались в [4, 7].

Образец имел форму пластинки, параллельной грани (100).

Поверхность пластинки освещались линейно поляризованным светом с длиной волны $\lambda = 500 \text{ нм}$, которая соответствует краю полосы собственной фотопроводимости $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ (рис. 1).

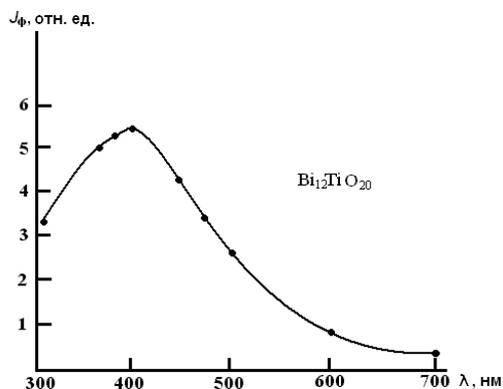


Рис. 1. Спектральное распределение продольной фотопроводимости в направлении [001]. Значения фототока, отнесенные к единице падающей энергии

В качестве источника света использовалась ксеноновая лампа и монохроматор ЗМР. Применялся описанный в [2] метод измерения, позволявший измерять как стационарный фотовольтаический ток, так в генерируемое им поле $\vec{E} = J/\sigma_\phi$.

Характеристики электрооптических кристаллов со структурой селенита

Материал	BSO	BGO	BTO	BGaO	BFO	BZO
Химическая формула	$\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$	$\text{Bi}_{12}\text{GeO}_{20}$	$\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$	$\text{Bi}_{25}\text{GaO}_{39}$	$\text{Bi}_{25}\text{FeO}_{39}$	$\text{Bi}_{38}\text{ZnO}_{58}$
Параметры решётки, нм	1,0104	1,0145	1,0174	1,0184	1,0194	1,0207
Плотность, г/см ³	9,20	9,22	9,07	9,35	9,27	9,31
Точка плавления, °С	900	923	875*	810*	795*	765*
Коэффициент теплового расширения, 1/К	$16,9 \cdot 10^{-6}$	$16 \cdot 10^{-6}$	$15,2 \cdot 10^{-6}$	$16,7 \cdot 10^{-6}$	$16,7 \cdot 10^{-6}$	$16,8 \cdot 10^{-6}$
Твердость по Моос	4,5	4,5	4,5	4,3	4,3	4,3
Прозрачность, мкм	0,4–7	0,4–7	0,45–7	0,4–7	0,45–7	0,4–7
Электрооптический коэффициент r	41	4,5	4,3	5,9	3,2	–
Сопротивления, Ом	$5 \cdot 10^{15}$	$5 \cdot 10^{15}$	$5 \cdot 10^{14}$	$5 \cdot 10^{10}$	$5 \cdot 10^{12}$	$5 \cdot 10^{10}$
Оптическая активность для 632,8 нм, град/мм	22	21	7	18	–	–
Диэлектрическая постоянная	52	46	55	34	80	63
Пьезоэлектрический модуль, $d_{14} 10^{11}$, Кл/Н	4,01	3,44	3,72	2,92	3,21	–
Фотовольтаический коэффициент при длине волны λ , нм	488	–	500	–	–	–
Коэффициент поглощения, α^* , см ⁻¹	13	–	8,5	–	–	–
Фотовольтаический коэффициент, K_{14} , А·см·Вт ⁻¹	$2,0 \cdot 10^{-9}$	–	$2,0 \cdot 10^{-10}$	–	–	–

В соответствии с (1) и симметрией точечной группы 23 при освещении кристалла в [100] направлении, к которой принадлежит $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$, выражение для фотовольтаического тока J_x имеет вид:

$$J_x = \frac{1}{2} \alpha^* K_{14} I \sin 2\beta, \quad (2)$$

где α^* – коэффициент поглощения света ($\alpha^* = 8,5 \text{ см}^{-1}$ при $\lambda = 500 \text{ нм}$), I – интенсивность света, K_{14} – компонента фотовольтаического тензора.

Все измерения проводились для постоянной интенсивности света $I = 2,3 \cdot 10^{-3} \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$ при температуре 133 К. Фотовольтаический ток измерялся в направлении [100]. Для чего на поверхность пластинки наносились электроды из серебряной пасты, снабженные отверстием. Таким об-

разом, свет распространился в направлении [100], а плоскость поляризации света, перпендикулярная грани [100], вращалась вокруг оси [100].

На рис. 2 представлена экспериментальная зависимость фотовольтаического тока J_x от угла β плоскостью поляризации света и осью [010].

Как видно из рис. 2 экспериментальная ориентационная зависимость фотовольтаического тока согласуется (2). При сравнении экспериментальных данных с (2) был измерен единственный отличный от нуля фотовольтаический коэффициент $K_{14} = 2 \cdot 10^{-10} \text{ А} \cdot \text{см} \cdot (\text{Вт})^{-1}$ в кубическом фотопьезоэлектрике $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$.

Коэффициенты K_{14} в кубическом фотопьезоэлектрике $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ более чем на порядок ниже соответствующих коэффициентов в $\text{LiNbO}_3:\text{Fe}$.

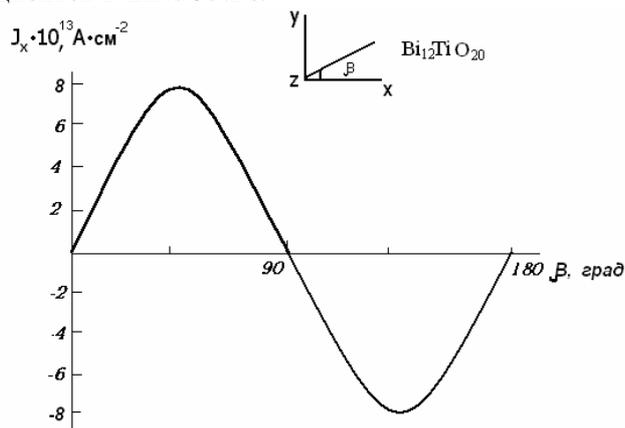


Рис. 2. Ориентационная зависимость фотовольтаического тока $J_x(\beta)$ в $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$. Направление распространения света указано в верхней части рисунка

Измерение фотовольтаического тока J_z и генерируемого им поля $\tilde{E} = J/\sigma_\phi$ (σ_ϕ – фотопроводимость) производилось путем снятия стационарных вольт-амперных характеристик [2]. При комнатной температуре эти измерения, не дали результатов, так как фотовольтаический эффект вуалировался приконтактной фотоЭДС или эффектом Дембера. Аналогичные результаты были получены для полупрозрачных никелевых электродов, напыленных на грани [100].

Исследование показывает, что фотовольтаический эффект должен возникать и в других кристаллах со структурой селенита.

2. Фоторефрактивный эффект в кубических фотопьезоэлектриках со структурой селенита

Влияние неравновесных носителей на двулучепреломление сегнето- и пьезоэлектрических кристаллов получило в литературе название фоторефрактивного эффекта (ФР эффект), который нашёл широкое применение для регистрации объемных голограмм. ФР эффект заключается в следующем. В результате локального освещения пьезоэлектрического кристалла интенсивным проходящим светом (сфокусированным лучом лазера) в объеме кристалла внутри светового пучка имеет место обратимое изменение двулучепреломления, главным образом, за счёт изменения показателя преломления необыкновенного луча n_e . Величина этого изменения достигает 10^{-4} – 10^{-3} для некоторых пьезоэлектриков (LiNbO_3 , LiTaO_3), а время его существования может изменяться в широких пределах, от миллисекунд в BaTiO_3 до месяцев в LiNbO_3 . Запись голограммы осуществляется благодаря объемной модуляции значения Δn , соответствующей модуляции записывающего луча. Разрешающая способность записи исключительно высокая, 10^2 – 10^4 лин/мм [6].

Главное преимущество этого метода оптической памяти по сравнению с фотографическими слоями заключается в возможности параллельной записи, считывания и стирания.

Как показано, знак и величина фотовольтаического тока зависят от симметрии кристалла и поляризации света. Фотовольтаический ток приводит к генерации в том же направлении аномально больших фотонапряжений. Таким образом, за время экспозиции t в кристалле возникает макроскопическое поле

$$\tilde{E} = \frac{4\pi}{\varepsilon} \int_0^t J dt. \quad (3)$$

Благодаря линейному электрическому эффекту поле \tilde{E} приводит к ФР эффекту:

$$\Delta n = \frac{1}{2} n_i^3 r_{ij} \tilde{E}, \quad (4)$$

где r_{ij} – электрооптические коэффициенты. Уравнение (4) записано в главной системе координат. После освещения поле \tilde{E} сохраняется в кристалле длительное время благодаря захвату неравновесных электронов и дырок. Этот механизм захвата ответствен за оптическую память. Стирание может осуществляться путем отжига кристалла при 170 °С. Имеются и другие методы стирания.

Согласно (2) в кубическом фотопьезоэлектрике $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ наблюдается ФВ эффект, знак и амплитуда которого зависят от ориентации плоскости поляризации света (рис. 2). Использование в голографической записи фотопьезоэлектриков дает преимущества. В этом случае запись осуществляется двумя когерентными лучами с поляризацией соответствующей фотовольтаическому току J_z и полю \tilde{E}_z в z -направлении ($\beta = 45^\circ$). Реконструирование записанной голограммы достигается путем освещения кристалла лучом когерентного света той же длины волны. Однако, поляризация этого луча выбирается таким образом, чтобы освещение не приводило к генерации фотовольтаического тока в z -направлении ($\beta = 90^\circ$). Стирание записанной голограммы достигается путем равномерного освещения поверхности лучом света с предыдущей поляризации ($\beta = 45^\circ$). Таким образом, использование света с разным направлением плоскости поляризации позволяет реконструировать голограмму, записанную в фотопьезоэлектрике без заметного повреждения. На рис. 3 показаны: голографическая запись, восстановление, и стирание записи в фотопьезоэлектрике.

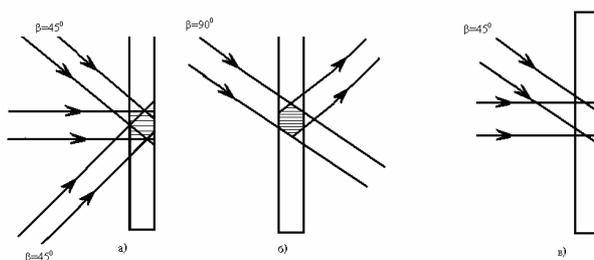


Рис. 3. Голографическая запись в фотопьезоэлектрике: а) запись элементарной голограммы; б) восстановление; в) стирание записи

Показано также, что АФ эффект в кристаллах без центра симметрии может быть применён как новый тип элементов – фотовольтаических преобразователей энергии. КПД преобразователей световой энергии в электрическую энергию на основе фотовольтаического эффекта пока низок.

Однако, сегнето- и пьезоэлектрики могут использоваться для генерации опорных напряжений низкой мощности. При этом спектральная чувствительность этих элементов варьируется в широкой области: от вакуумной ультрафиолетовой до красной видимой области.

Имеется возможности применения этих процессов в бессеребряной фотографии и видиконах, а также в нанотехнологиях.

Заключение

Обнаружен и исследован фотовольтаический эффект и определён единственный отличный от нуля фотовольтаический коэффициент $K_{14} = 2 \cdot 10^{-10} \text{ А} \cdot \text{см} \cdot (\text{Вт})^{-1}$ при температуре 133 К и при $\lambda = 500 \text{ нм}$ для $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$. Коэффициенты K_{14} в кубическом фотопьезоэлектрике $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ более чем на порядок меньше соответствующих коэффициентов в $\text{LiNbO}_3:\text{Fe}$. Обсуждены некоторые экспериментальные и физические основы фотовольтаического эффекта в кристаллах со структурой селенита. Исследование показывает, что фотовольтаический эффект должен возникать и в других кристаллах со структурой селенита.

Показана возможность использования фотопьезоэлектриков в голографической записи. В этом случае запись осуществляется двумя когерентными лучами с поляризацией, соответствующей фотовольтаическому току. Реконструирование записанной голограммы достигается путем освещения кристалла лучом когерентного света той же длины волны. Однако поляризация этого луча выбирается таким образом, чтобы освещение не приводило к генерации фотовольтаического

тока. Стирание записанной голограммы достигается путем равномерного освещения поверхности лучом света с предыдущей поляризации.

Автор благодарит В.А. Кузнецова за предоставление кристаллов, С. Шамирзаеву и В.М. Фридкину за обсуждение.

Литература

1. Glass, A.M. High-voltage Bulk Photovoltaic effect and the Photorefractive process in LiNbO_3 / A.M. Glass, D. Voh der Linbe, T.J. Nerren // J.Appl. Phys. Letters. – 1974. – V. 25, № 4. – P. 233–236.
2. Фридкин, В.М. Фотосегнетоэлектрики / В.М. Фридкин. – М.: Наука, 1979. – 216 с.
3. Белиничер, В.И. Исследования фотогальванических эффектов в кристаллах: дис. ... докт. физ.-мат. наук / В.И. Белиничер. – Новосибирск, 1982. – 350 с.
4. Рост кристаллов из высокотемпературных растворов / А.Н. Лобачев, И.П. Кузьмина, Ю.В. Шалдин и др. – М.: Наука, 1977. – 180 с.
5. Стурман, Б.И. Фотогальванические эффекты в средах без центра инверсии / Б.И. Стурман, В.М. Фридкин. – М.: Наука, 1992. – 208 с.
6. Фридкин, В.М. Объемный фотовольтаический эффект в кристаллах без центра симметрии / В.М. Фридкин // Кристаллография. – 2001. – Т. 46, № 4. – С. 722–726.
7. Кристаллизация титанатов висмута / М.Л. Барсукова, В.А. Кузнецов, Л.Н. Лобачев, Т.Н. Танакина // Кристаллография. – 1972. – Т. 17. – Вып. 4. – С. 846–850.
8. Петров, М.П. Фотогальванический эффект в силикате висмута ($\text{Bi}_{12}\text{SiO}_{20}$) / М.П. Петров, А.И. Грачев // Письма в ЖЭТФ. – 1979. – Т. 30. – С. 18–21.

Поступила в редакцию 16 апреля 2010 г.

THE PHOTOVOLTAIC AND PHOTOREFRACTIVE EFFECTS IN CRYSTALS WITH THE SELENITE STRUCTURE

The photovoltaic effect in crystals with selenite structure is revealed and researched in the article. The photovoltaic coefficient $K_{14} = 2 \cdot 10^{-10} \text{ A} \cdot \text{sm} \cdot (\text{W})^{-1}$ at the temperature 133 K at illumination by light with wavelength $\lambda = 500 \text{ nm}$ for $\text{Bi}_{12}\text{TiO}_{20}$ is identified. Some experimental and physical basics of the photovoltaic effect in crystal with selenite structure are reviewed. The research shows that the photovoltaic effect should also appear in other crystals with the selenite structure.

The possibility of use of the photopiezoelectrics with the selenite structure in holographic record is shown.

Keywords: photovoltaic effect, photovoltaic factor, photopiezoelectric, crystals with the selenite structure.

Karimov Bakhodir Khoshimovich is Cand.Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Physics Department, Fergana State University.

Каримов Баходир Хошимович – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра физики, Ферганский государственный университет.

e-mail: karimov1948@rambler.ru

ИЗМЕНЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ РЕЛАКСАЦИИ НАПРЯЖЕНИЙ АЛЮМИНИЯ А 85 ПОД ВЛИЯНИЕМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА ПРИ РАЗЛИЧНЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

С.А. Невский, С.В. Коновалов, В.Е. Громов

Изучено поведение параметров процесса релаксации напряжений технически чистого алюминия А 85 при температурах 296 и 333 К в условиях влияния слабых электрических потенциалов. Установлено, что наложение потенциала на поверхность алюминия, подвергаемого испытанию на релаксацию, приводит к изменению её параметров.

Ключевые слова: алюминий, релаксация напряжений, активационный объем.

Введение

В последние годы не ослабевает интерес ученых в области физического материаловедения и физики конденсированного состояния к проблеме влияния различного рода электромагнитных полей на прочность и пластичность материалов. Это обусловлено как чисто научными, так и практическими аспектами влияния внешних энергетических воздействий. К настоящему времени установлено влияние импульсного электрического тока и электростатических полей на пластическую деформацию металлов [1–3]. Воздействие электростатического поля хорошо изучено в диэлектрических кристаллах. В случае металлов исследование влияния электростатических полей усложняется, так как свободные носители заряда экранируют полевое воздействие. В [2] предложен способ обойти указанное препятствие путем помещения образца в диэлектрическую оболочку. Авторы [4–6] считают, что в данном случае выгоднее всего изменять электрический потенциал поверхности металла. В их работах показано, что изменение потенциала поверхности образца, подвергаемого испытанию на ползучесть, изменяет ее скорость [4] и снижает вязкость разрушения [5, 6]. Недостатком данных работ является то, что они охватывают только один вид пластической деформации – ползучесть. Для построения полной картины влияния электрических потенциалов на неактивные виды пластической деформации необходимо проведение исследования релаксации напряжений. В этой связи целью исследования является изучение изменений параметров процесса релаксации под влиянием электрического потенциала.

Материал и методика эксперимента

Исследования выполнены на образцах технически чистого алюминия А 85, которые после изготовления подвергались отжигу при 773 К в течение 2-х часов для снятия внутренних напряжений. Испытания образцов проводили на деформационной машине с программным обеспечением [7], позволяющим записывать релаксационные кривые. В течение испытания образец подвергается нагреву до определенной температуры при помощи специально сконструированной под размер образца нагревательной печи. Контроль температуры испытаний осуществлялся термопарой. Как и в работах [4–6] электрический потенциал в диапазоне от –1,5 В до +1,5 В подводился к образцу от стабилизированного источника питания при его электрической изоляции от элементов испытательной установки.

Из полученных релаксационных кривых по методикам [8, 9] вычислялись параметры процесса релаксации напряжений: активационный объем γ и коэффициент чувствительности скорости пластической деформации к изменению внешнего напряжения m .

Эффект влияния электрического потенциала оценивался величинами относительного изменения активационного объема ζ и коэффициента чувствительности скорости пластической деформации к изменению внешнего напряжения ξ , определяемыми по формулам:

$$\zeta = \frac{\gamma_{el} - \gamma_0}{\gamma_0}, \quad (1)$$

$$\xi = \frac{m_{el} - m_0}{m_0}, \quad (2)$$

где γ_{el} , m_{el} – значения активационного объема и коэффициента чувствительности скорости пластической деформации к изменению внешнего напряжения при наложении электрического потенциала, а γ_0 и m_0 – без него соответственно.

Результаты эксперимента и их обсуждения

На рис. 1, а приведены характерные графики зависимости глубины релаксации $\Delta\sigma$ от времени t при температуре 296 К, что совпадает с общепринятыми представлениями о протекании процесса в таких условиях [10]. Видно, что при наложении потенциала происходит ускорение релаксации напряжений.

Рис. 1, б демонстрирует графики зависимости $\Delta\sigma$ от t при 333 К. Как и на рис. 1, а кривые 1 и 3 получены при $\varphi = \pm 1$ В, а кривая 2 – при $\varphi = 0$ В. Видно, что кривые расположены друг к другу достаточно близко, следовательно, при температуре больше 333 К эффект влияния потенциала незначителен.

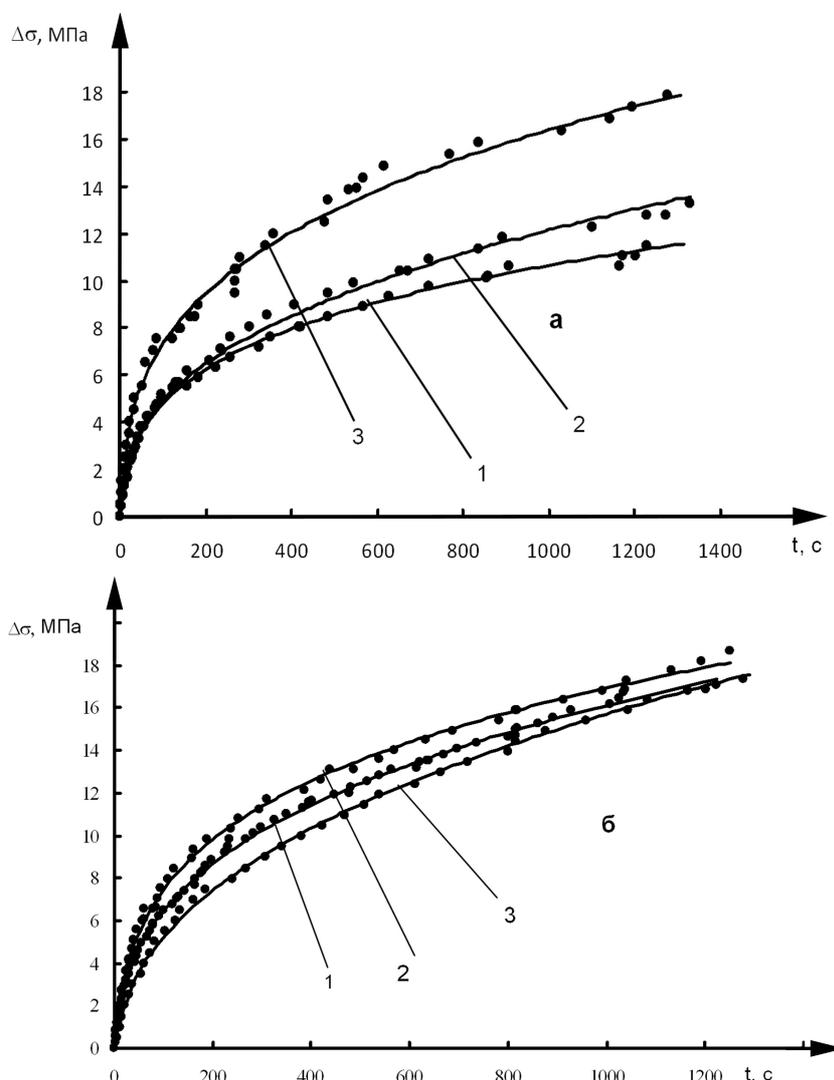


Рис. 1. Изменение глубины релаксации от времени испытания в обычных условиях (кривая 1), при потенциале поверхности –1 В (кривая 2) и +1 В (кривая 3).
Температура испытания: а) 296 К, б) 333 К

Такое поведение процесса релаксации под воздействием потенциала при различных температурах не может не отразиться на его параметрах: активационном объеме γ и коэффициенте чувствительности скорости пластической деформации к изменению внешнего напряжения m .

Зависимости относительных изменений этих параметров ζ и ξ представлены на рис. 2 и 3, из которых следует, что при 296 К величины ζ и ξ при наложении потенциала уменьшаются вне зависимости от его знака (кривая 1). При температуре 333 К наблюдается возрастание ζ и ξ (кривая 2). Различие между левой и правой ветвями графика 2 обусловлено, по-видимому, статистическим разбросом.

Качественно объяснить причины влияния слабых электрических потенциалов на релаксацию напряжений при различных температурах можно исходя из следующих представлений. Изменение электрического потенциала образца приводит к тому, что избыточный заряд сосредотачивается на его поверхности. Следовательно, изменение параметров процесса релаксации можно связать с явлениями, происходящими на поверхности металла.

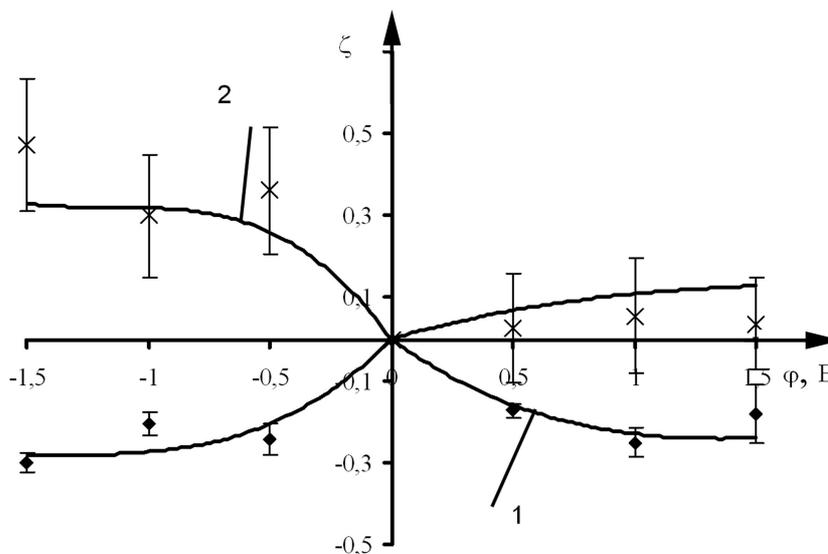


Рис. 2. Зависимость относительного изменения активационного объема от величины электрического потенциала при температуре 296 К (кривая 1), 333 К (кривая 2)

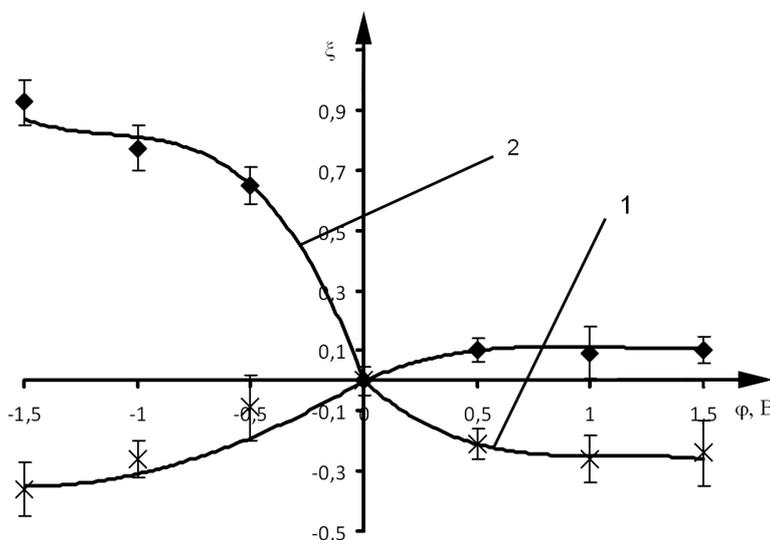


Рис. 3. Зависимость коэффициента чувствительности скорости пластической деформации к изменению внешнего напряжения от потенциала при температуре 296 К (кривая 1), 333 К (кривая 2)

При температуре 296 К, по-видимому, проявляется явление аналогичное обнаруженному в [11]. Его суть заключается в том, что при применении поверхностно-активных веществ в процессах обработки металлов давлением происходит сосредоточение пластической деформации в поверхностных слоях материала. В нашем случае, скорее всего, наложение электри-

ческого потенциала на образец приводит к синергетической перестройке дислокационных ансамблей в поверхностных слоях материала [12].

Эффект увеличения активационного объема под воздействием электрического потенциала при 333 К можно связать с эффектом описанным в работе [13]. Суть этого явления заключается в том, что приложение электрического поля при изотермической выдержке увеличивает твердость материалов и, соответственно, уменьшает релаксационную податливость материала [14]. Однако для подтверждения или опровержения выдвинутых предположений необходимо проведение дополнительных исследований с привлечением современных методов материаловедения и физики конденсированного состояния.

Выводы

1. Установлено влияние электрического потенциала на параметры релаксации напряжений при температурах 296 и 333 К. При 296 К активационный объем и коэффициент чувствительности скорости пластической деформации к изменению внешнего напряжения уменьшаются, а при 333 К увеличиваются вне зависимости от его знака.

2. Сделано предположения о связи установленных изменений с явлениями, происходящими на поверхности металла.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России на 2009–2013 гг.» (гос. контракт № П411).

Литература

1. Electromagnetic fields effect on the structure and characteristic of materials (Book of the International seminar articles, 19 – 21 May 2009, Institute for Machines Science of the Russian Academy of Sciences Moscow) / Ed. By Yu. Baranov, V. Gromov, G. Tang. – Novokuznetsk: Novokuznetsk Polygraphic Center, 2009. – 380 p.

2. Физические основы и технологии обработки современных материалов (теория, технология, структура и свойства): в 2 т. / О.А. Троицкий, Ю.В. Баранов, Ю.С. Аврамов, А.Д. Шляпин. – Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004. – Т. 1. – 590 с.

3. Зуев, Л.Б. Физика электропластичности щелочно-галлоидных кристаллов / Л.Б. Зуев. – Новосибирск: Наука, 1990. – 120 с.

4. О влиянии электрического потенциала на скорость ползучести алюминия / С.В. Коновалов, В.И. Данилов, Л.Б. Зуев и др. // ФТТ. – 2007. – Т. 49. – Вып. 8. – С. 1389–1391.

5. Влияние электрического потенциала на поверхность разрушения алюминия при ползучести / Ю.Ф. Иванов, С.В. Коновалов, О.А. Столбоушкина, В.Е. Громов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2009. – Вып. 1. – № 22(155). – С. 66–71.

6. Роль электрического потенциала в ускорении ползучести и формировании поверхности разрушения Al / С.В. Коновалов, Ю.Ф. Иванов, О.А. Столбоушкина, В.Е. Громов // Известия РАН. Серия физическая. – 2009. – Т. 73, № 9. – С. 1315–1318. (863124)

7. Автоматизированная установка для регистрации и анализа ползучести / С.В. Коновалов, В.И. Данилов, Л.Б. Зуев и др. // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. – 2007. – Т. 73, № 8. – С. 64–66.

8. Dotsenko, V.I. Stress relaxation in crystals / V.I. Dotsenko // Physica Status Solidi (b). – 1979. – V. 93. – P. 11–43.

9. Количественные параметры быстрой релаксации напряжений в гранулированном высокопрочном алюминиевом сплаве / В.Ф. Гайдученя, Э.Б. Калмыков, В.В. Мишакин, В.А. Скуднов // ФММ. – 1988. – Т. 65. – Вып. 8. – С. 1186–1190.

10. Борздыка, А.М. Релаксация напряжений в металлах и сплавах / А.М. Борздыка, Л.Б. Гецов. – М.: Металлургия, 1978. – 256 с.

11. Лихтман, В.И. Физико-химическая механика металлов / В.И. Лихтман, Е.Д. Щукин, П.А. Ребиндер. – М.: Издательство АН СССР, 1962. – 303 с.

12. Малыгин, Г.А. Процессы самоорганизации дислокаций и пластичность кристаллов / Г.А. Малыгин // Успехи физических наук. – 1999. – Т. 169, № 9. – С. 979–1010.

13. Клыпин, А.А. Структура и свойства сплавов при воздействии электрического поля / А.А. Клыпин // МиТОМ. – 1979. – № 3. – С. 12–15.

14. Ровинский, Б.М. Температурная зависимость параметров релаксации напряжений в металлах и сплавах / Б.М. Ровинский, Г.С. Воротников // Механизмы релаксационных явлений в твердых телах: сб. науч. тр. / Институт металлургии им. А.А. Байкова. – М.: Наука, 1972. – 296 с.

Поступила в редакцию 14 апреля 2010 г.

CHANGE OF PARAMETERS OF STRESS RELAXATION OF ALUMINUM A 85 UNDER INFLUENCE OF ELECTRICAL POTENTIAL AT VARIOUS TEMPERATURES

The behavior of parameters of the stress relaxation process of commercially pure aluminum A 85 is researched at temperatures 296 and 333 K under conditions of influence of weak electric potentials. It is established that superimposition of potential on a surface of the aluminum tested on relaxation leads to change of its parameters.

Keywords: aluminum, stress relaxation, activation volume.

Nevsky Sergey Andreevich is a postgraduate student of the Physics Department, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk.

Невский Сергей Андреевич – аспирант кафедры физики, Сибирский государственный индустриальный университет, г.Новокузнецк.

e-mail: nevskiy_sa@physics.sibsiu.ru

Kononov Sergey Valerievich is a Cand.Sc. (Engineering), associate professor of the Physics Department, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk.

Коновалов Сергей Валерьевич – кандидат технических наук, доцент кафедры физики, Сибирский государственный индустриальный университет, г.Новокузнецк.

e-mail: kononov@physics.sibsiu.ru

Gromov Victor Evgenievich is Dr.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Physics Department, Siberian State Industrial University, Novokuznetsk.

Громов Виктор Евгеньевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой физики, Сибирский государственный индустриальный университет, г. Новокузнецк.

e-mail: gromov@physics.sibsiu.ru

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ РЕЖИМОВ ТЕЧЕНИЯ ЖИДКОЙ ПЛЕНКИ В КОНТАКТЕ С ГАЗОВЫМ ПОТОКОМ

Л.А. Прокудина, Е.А. Саламатов

Исследована неустойчивость волнового течения жидкой пленки в контакте с газовым потоком для чисел Рейнольдса $Re \in [1; 10]$. Изучено влияние касательного напряжения τ на неустойчивость и волновые характеристики вертикальной жидкой пленки в режимах противотока и прямотока.

Ключевые слова: жидкая пленка, неустойчивость, волновые характеристики, касательное напряжение.

Процессы течения жидких пленок, обдуваемых газовым потоком, используются в химической, металлургической, энергетической, пищевой и других отраслях промышленности.

На свободной поверхности жидкой пленки возникают и развиваются волны, которые способствуют интенсификации технологических процессов, поэтому необходимо знать, каким образом физические факторы (например, газовый поток) влияют на течение пленки.

Рассмотрим волновое течение тонкого слоя вязкой однородной несжимаемой жидкой пленки по вертикальной гладкой непроницаемой поверхности под действием силы тяжести.

С поверхностью стекания связана система координат ОХУ, направление оси ОХ совпадает с направлением стекания пленки, ось ОУ направлена по нормали в пленки жидкости.

Пленка обтекается газовым потоком, который движется параллельно оси ОХ и создает на свободной поверхности жидкости постоянное касательное напряжение τ . Если направление движения газового потока совпадает с направлением стекания жидкой пленки, реализуется режим прямотока ($\tau > 0$), если направления движения пленки и газа противоположны – режим противотока ($\tau < 0$), если газовый поток отсутствует ($\tau = 0$) – режим свободного стекания.

Уравнение эволюции свободной поверхности жидкой пленки [1, 2] в линейном приближении имеет вид

$$\left(b_{11} \frac{\partial}{\partial x} - 1 \right) \frac{\partial \psi}{\partial t} + b_4 \frac{\partial^4 \psi}{\partial x^4} + b_2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + b_1 \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0, \quad (1)$$

где $\psi(x, t)$ – отклонение свободной поверхности жидкой пленки от стационарного состояния,

$b_{11} = \frac{5}{24} Re^2 F$, $b_4 = -\frac{Re \sigma}{3}$, $b_2 = \frac{3}{40} Re^3 F (F - \tau)$, $b_1 = -Re(F - \tau)$, Re – число Рейнольдса,

$F = \frac{3}{Re} + 1,5\tau$ – число Фруда, σ – поверхностное натяжение.

Из уравнения (1) получим дисперсионное соотношение

$$\omega(b_{11}k + 1) + b_4k^4 - b_2k^2 + b_1ik = 0, \quad (2)$$

где $\omega = \omega_r + i\omega_i$, ω_r – частота, ω_i – инкремент.

Из соотношения (2) в явном виде найдем:

$$\omega_r = \frac{(-b_4k^4 + b_2k^2) \cdot b_{11}k - b_1k}{(b_{11}k)^2 + 1}, \quad (3)$$

$$\omega_i = \frac{b_4k^4 - (b_2 + b_1b_{11})k^2}{(b_{11}k)^2 + 1}. \quad (4)$$

Результаты вычислительного эксперимента [2] для жидкой пленки воды для чисел Рейнольдса $Re \in [1; 10]$ приведены на рис. 1–4. Режим прямотока ($\tau < 0$) способствует уменьшению скоростей роста возмущений ω_i (рис. 1, кривая 1), режим противотока ($\tau > 0$) – увеличению скоростей роста возмущений ω_i (рис. 1, кривая 3).

В режиме противотока фазовые скорости $C = \omega_r/k$ (рис. 2, кривая 3) возмущений меньше фазовых скоростей в режиме свободного стекания (рис. 2, кривая 1).

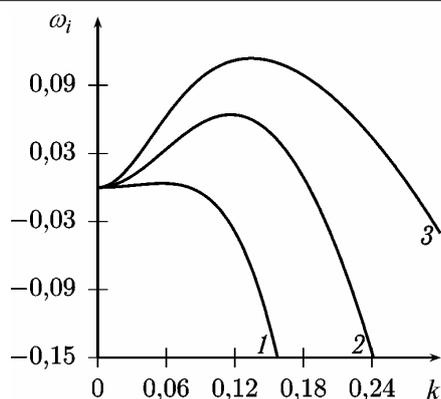


Рис. 1. Инкремент жидкой пленки ($Re = 10$):
1 – $\tau = -0,15$; 2 – $\tau = 0$; 3 – $\tau = 0,15$

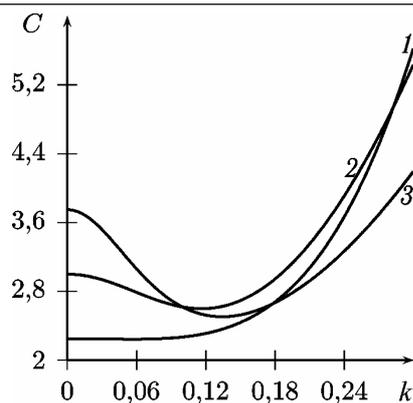


Рис. 2. Фазовые скорости ($Re=10$):
1 – $\tau = -0,15$; 2 – $\tau = 0$; 3 – $\tau = 0,15$

Для жидкости в контакте с газовым потоком возможны изменения поверхностного натяжения σ , что приводит к изменению волновых параметров жидкой пленки. Увеличение поверхностного натяжения σ способствует уменьшению скоростей роста возмущений (рис. 3, кривая 3), увеличению фазовых скоростей (рис. 4, кривая 3). При уменьшении величины σ скорости роста возмущений увеличиваются (рис. 3, кривая 1), уменьшаются фазовые скорости (рис. 4, кривая 1).

Из условия нейтральной устойчивости

$$\omega_i = 0 \quad (5)$$

определим волновое число нейтрально устойчивых возмущений

$$k_n^2 = \frac{b_2 + b_1 b_{11}}{b_4} = \frac{2}{5\sigma} Re^2 F(F - \tau). \quad (6)$$

В плоскости (Re, k) выражение (6) задает кривую (рис. 5), которая отделяет область неустойчивости ($\omega_i > 0$) от области устойчивости ($\omega_i < 0$).

Течение жидкой пленки неустойчиво в рассматриваемых диапазонах изменения числа Рейнольдса Re . Режим противотока ($\tau > 0$) оказывает дестабилизирующее влияние на течение жидкой пленки, область неустойчивости расширяется по диапазону волновых чисел k . Режим прямотока ($\tau < 0$) способствует стабилизации течения, наблюдается сокращение области неустойчивости по диапазону волновых чисел k . Воздействие газового потока позволяет расширить диапазон неустойчивых возмущений на 48 % в режиме противотока, в режиме прямотока – уменьшить на 57 %.

Режимы течения жидких пленок, для которых инкремент ω_i достигает максимального значения (волны максимального роста), называют оптимальными. Параметры потока в целом близки к параметрам волн максимального роста [4].

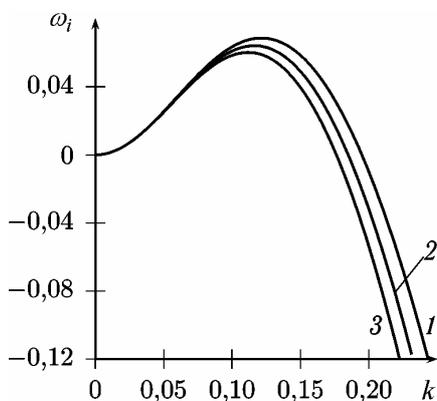


Рис. 3. Инкремент жидкой пленки ($Re = 10$):
1 – $\Delta\sigma = -10\%$; 2 – $\Delta\sigma = 0$; 3 – $\Delta\sigma = 10\%$

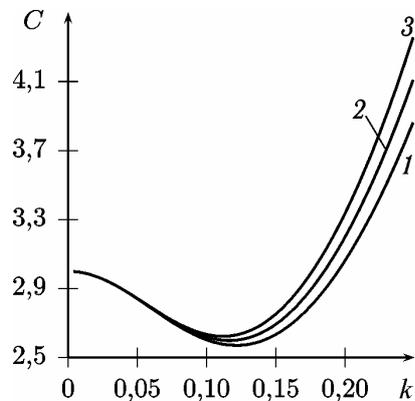


Рис. 4. Фазовые скорости ($Re = 10$):
1 – $\Delta\sigma = -10\%$; 2 – $\Delta\sigma = 0$; 3 – $\Delta\sigma = 10\%$

Параметры волн максимального роста найдем из уравнения

$$\frac{d\omega_i}{dk} = 0, \quad (7)$$

решив которое, получим

$$k_m^2 = \frac{-1 + \sqrt{1 + \frac{b_{11}^2(b_2 + b_1 b_{11})}{b_4}}}{b_{11}^2} = \frac{-1 + \sqrt{1 + (b_{11} k_n)^2}}{b_{11}^2}. \quad (8)$$

В плоскости (Re, k) выражение (8) задает кривую максимального роста (рис. 5).

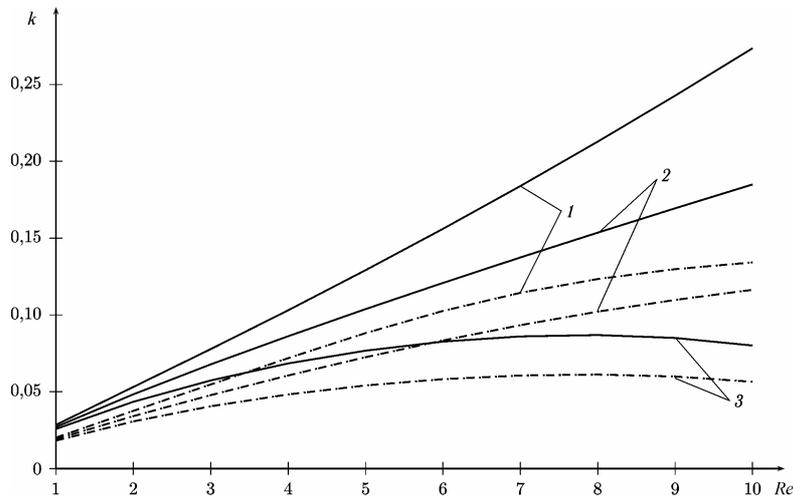


Рис. 5. Области неустойчивости жидкой пленки:
1 – режим противотока ($\tau = 0,15$); 2 – $\tau = 0$; 3 – режим прямотока ($\tau = -0,15$);
сплошные линии – кривые нейтральной устойчивости;
пунктирные линии – кривые максимального роста

Из зависимости (4) найдем

$$\frac{d\omega_i}{dk} = -2b_{11}k \frac{dC}{dk}.$$

Для волн максимального инкремента (7) получим

$$\frac{dC}{dk} = 0, \quad (9)$$

т.е. волны максимального роста обладают минимальной фазовой скоростью (рис. 2).

Для групповой скорости

$$V = \frac{d\omega_r}{dk} = \frac{d}{dk}(kC) = k \frac{dC}{dk} + C. \quad (10)$$

Учитывая соотношение (9), получим равенство фазовой скорости C и групповой скорости V волн максимального роста (рис. 6)

$$V(k_m) = C(k_m). \quad (11)$$

Увеличение $|\tau|$ в режиме прямотока ($\tau < 0$) способствует уменьшению фазовых C и групповых V скоростей. При увеличении $|\tau|$ в режиме противотока ($\tau > 0$) фазовые C и групповые V скорости увеличиваются, если $Re \leq 8$ (рис. 6, кривые 1–4). Для $Re > 8$ увеличение $|\tau|$ в режиме противотока приводит к уменьшению фазовых и групповых скоростей возмущений, обладающих максимальной скоростью роста (рис. 6, кривые 5, 6).

Обдув газовым потоком свободной поверхности жидкой пленки в режиме противотока позволяет увеличить скорости роста возмущений практически в два раза по сравнению с режимом свободного стекания (рис. 7). В режиме прямотока скорости роста возмущений можно уменьшить до 75 %.

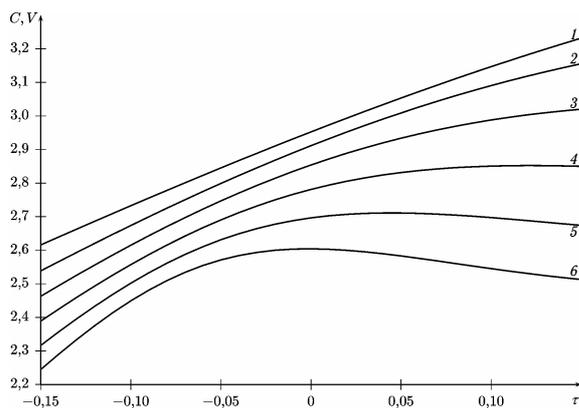


Рис. 6. Фазовые C и групповые V скорости волн максимального роста:
 1 – $Re = 5$; 2 – $Re = 6$; 3 – $Re = 7$;
 4 – $Re = 8$; 5 – $Re = 9$; 6 – $Re = 10$

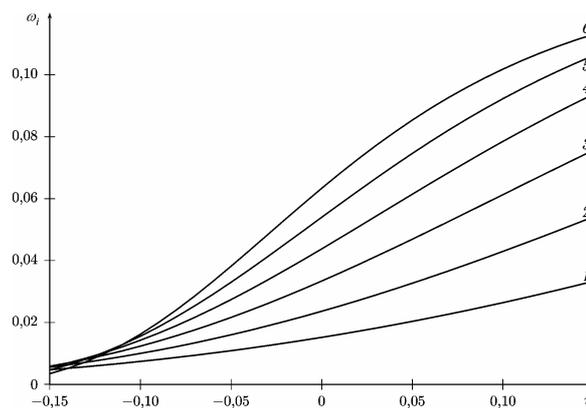


Рис. 7. Инкременты ω_i волн максимального роста:
 1 – $Re = 5$; 2 – $Re = 6$; 3 – $Re = 7$;
 4 – $Re = 8$; 5 – $Re = 9$; 6 – $Re = 10$

Найденные закономерности течения жидкой пленки в контакте с газовым потоком могут быть использованы при конструировании пленочного технологического оборудования.

Литература

1. Прокудина, Л.А. Волновое течение неизоэнтальпической жидкой пленки: препринт / Л.А. Прокудина, Г.П. Вяткин. – Челябинск: Изд-во ЮУрГУ, 1998. – 42 с.
2. Прокудина, Л.А. Математическое моделирование неустойчивости тонкого слоя вязкой жидкости / Л.А. Прокудина, Е.А. Саламатов // Вестник ЮУрГУ. Серия «Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника». – 2009. – Вып. 9. – № 3(136). – С. 48–54.
3. Область неустойчивости жидкой пленки v.2: свидетельство об отраслевой регистрации разработки № 7231 / Е.А. Саламатов, Л.А. Прокудина. – № 50200602018; заявл. 16.11.2006; опубл. 01.07.2007; Компьютерные учебные программы и инновации № 7. – 1 с.
4. Алексеенко, С.В. Волнообразование при течении пленки жидкости на вертикальной стенке / С.В. Алексеенко, В.Е. Накоряков, Б.Г. Покусаев // Прикладная механика и техническая физика. – 1979. – Т. 20, № 6. – С. 77–87.

Поступила в редакцию 14 июля 2010 г.

MODELING OF OPTIMAL MODES OF LIQUID FILM FLOW IN CONTACT WITH GAS STREAM

Instability of falling liquid film in contact with gas stream is investigated at Reynolds numbers $Re \in [1; 10]$. Effect of shear stress τ on instability and wave characteristics of vertical liquid film in co- and countercurrent modes of flow is studied.

Keywords: liquid film, instability, wave characteristics, shear stress.

Prokudina Lyudmila Alexandrovna is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Applied Mathematics Department, South Ural State University.

Прокудина Людмила Александровна – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра прикладной математики, механико-математический факультет, Южно-Уральский государственный университет.

Salamatov Evgeny Alexandrovich is post-graduate student, Applied Mathematics Department, South Ural State University.

Саламатов Евгений Александрович – аспирант, кафедра прикладной математики, механико-математический факультет, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: sea20091983@mail.ru

КОМПЬЮТЕРНАЯ ОБРАБОТКА ИЗОБРАЖЕНИЯ В МЕТОДЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТА ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ ЖИДКОСТИ ПО ФОРМЕ ПОВЕРХНОСТИ КАПЛИ

В.Г. Речкалов, В.Л. Ушаков, Г.П. Пызин, В.П. Бескачко

Предлагается метод повышения точности измерения поверхностного натяжения жидкости по форме свободной поверхности капли, основанный на технологии компьютерной обработки изображения.

Ключевые слова: измерение поверхностного натяжения, параметры формы капли, компьютерная обработка изображения.

Метод измерения коэффициента поверхностного натяжения по форме свободной поверхности капли имеет два существенных преимущества перед другими методами.

1. Физическая простота явления, лежащего в его основе. Еще в 1806 г. Лаплас получил точное дифференциальное уравнение для свободной поверхности жидкости, используя которое можно определить значение коэффициента поверхностного натяжения на основании только объема формы поверхности капли без каких-либо дополнительных гипотез.

2. Метод является бесконтактным. Чаще всего обмер формы поверхности капли осуществляется по ее оптическому изображению (фотографии).

Благодаря второму обстоятельству метод широко используется в исследованиях высокотемпературных и химически агрессивных жидкостей. В прочих же случаях он не особенно популярен в связи со множеством причин, препятствующих точному определению формы капли. Из них отметим, во-первых, что поверхность любой жидкости всегда находится в движении вследствие теплового движения (капиллярные волны), вибраций подложки или подвеса, обусловленных сейсмическим шумом, и подобными причинами. На рис. 1 показан сильно увеличенный фрагмент нижней части висящей капли с волной, возбужденной сейсмическим шумом.

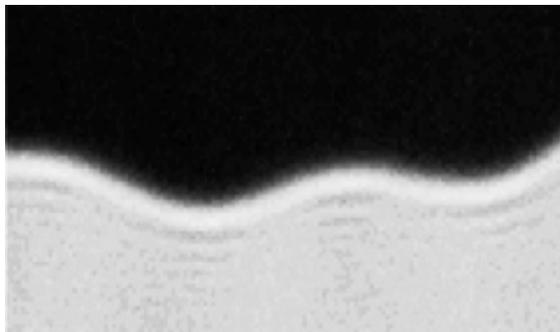


Рис. 1. Волна на поверхности капли, возбужденная сейсмическим шумом

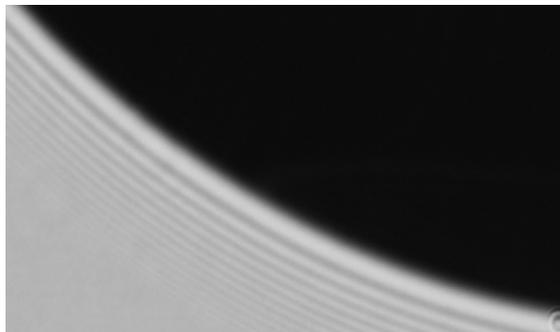


Рис. 2. Дифракционная картина у поверхности капли

Во-вторых, граница капли на фотографии представляется не как граница геометрической тени, а в виде дифракционной картины, состоящей из ряда полос (рис. 2).

В наших экспериментах используется система защиты капли от вибрационных помех, которая в законченном виде будет иметь три ступени. Для учета дифракционных эффектов применяется специальная компьютерная обработка цифрового изображения капли, на которой мы остановимся подробнее.

Алгоритм выделения контура капли. Выделение контура капли из ее цифрового изображения выполняется в три этапа. На первом этапе находится грубый контур по заданному пороговому значению интенсивности света на границе. В результате мы получаем массив координат размером приблизительно в 7 тыс. точек. На следующем этапе определяется сглаженный контур при помощи скользящей кубической параболы, покрывающей небольшой фрагмент контура и содержащий от 100 до 200 точек в зависимости от размера массива координат. На этом этапе мы получаем массив координат и углов наклона касательной к контуру, содержащий 3–4 тысячи то-

чек. Следующий, третий этап, является наиболее сложным. Для каждой точки сглаженного контура снимается функция интенсивности (значений пикселей) вдоль направления нормали к поверхности контура (рис. 3).

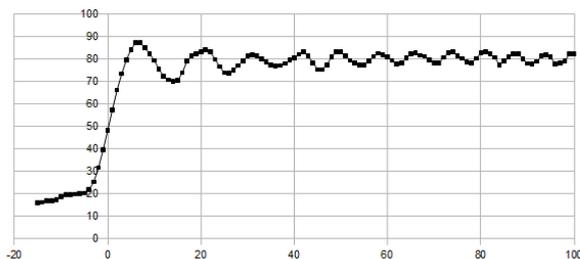


Рис. 3. Функция значений пикселей в направлении нормали к контуру капли. По оси x отложено расстояние от граничной точки по нормали к контуру капли, измеренное в пикселях. По оси y – значения пикселей

Полученная функция аппроксимируется рядом Фурье и находится, при каком значении аргумента ее значение совпадает с расчетной интенсивностью света, отвечающей границе геометрической тени от поверхности капли. Эта точка и принимается за граничную точку.

Полученные координаты граничных точек выводятся в файл, который используется следующей программой для анализа и вычисления поверхностного натяжения.

Определение поверхностного натяжения. Форма свободной поверхности жидкости описывается уравнением Лапласа

$$P = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right). \quad (1)$$

Если капля висит, то минимальное давление жидкости будет в нижней ее части. Обозначим это давление P_0 , а радиус кривизны в вершине капли r_0 . Тогда можем записать:

$$P_0 = \frac{2\sigma}{r_0}. \quad (2)$$

Совместив начало системы координат с вершиной капли и направив ось y вверх, мы можем написать $P = P_0 + \rho g y$. С учетом этого уравнение (1) принимает вид

$$\rho g y + \frac{2\sigma}{r_0} = \sigma \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right) \quad (3)$$

или

$$\frac{\rho g}{\sigma} r_0^2 \frac{y}{r_0} + 2 = \frac{1}{R_1/r_0} + \frac{1}{R_2/r_0}. \quad (4)$$

Отношение $\frac{\rho g}{\sigma}$ (капиллярный коэффициент) при данном g зависит только от природы жидкости. Его размерность $[c] = 1/\text{м}^2$. Оценка c для воды дает $c_g \approx 1000 \cdot 9,801 / 0,073 \approx 134260 \text{ 1/м}^2$.

Безразмерные величины y/r_0 , R_1/r_0 и R_2/r_0 , следуя за Адамсом [1], будем далее обозначать как y , R_1 и R_2 . Если величину поверхностного натяжения измерять в мН/м, а радиус кривизны капли в ее вершине в мм, тогда в уравнении (4) появляется безразмерный коэффициент 10^{-3} :

$$10^{-3} \frac{\rho g}{\sigma} r_0^2 y + 2 = \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}. \quad (5)$$

В нашей программе используется уравнение Лапласа в форме (5). Расчетные значения координат профиля капли по уравнению (5) вычисляются с использованием алгоритма Адамса [1]. Задавшись некоторыми значениями коэффициента поверхностного натяжения и радиуса кривизны в вершине капли, мы можем рассчитать массив значений координат точек на контуре капли. Затем этот массив сравнивается с экспериментальным, полученным на этапе обработки фотографии. Если массивы совпадают, то мы можем считать, что капиллярный коэффициент нам известен и мы можем рассчитать величину коэффициента поверхностного натяжения. Если массивы не совпадают, то следует задать новые значения для r_0 и c и выполнить сравнение заново. Осталось уточнить, каким образом будут сравниваться массивы координат.

Процедура сравнения контуров. Программа, назовем ее Adams, вычисляет координаты точек, начиная с вершины капли. Всего вычисляется от 30 до 50 тысяч точек $(x_a[i], y_a[i])$ вдоль одной половины профиля капли. Точки на второй половине определяются из соображений симмет-

рии и имеют координаты $(-x_a[i], y_a[i])$. Точки $(x[i], y[i])$, полученные в эксперименте, покрывают весь контур. Их число колеблется от двух до пяти тысяч, так что полное число участвующих в расчете точек имеет порядок 10^5 .

Затем производится сравнение экспериментального и расчетного массивов. Для каждой точки из экспериментального массива вычисляется ее расстояние до расчетного профиля. Это расстояние берется со знаком «+», если экспериментальная точка лежит снаружи от расчетного профиля; в противном случае расстояние берется со знаком «-».

Найденные значения расстояний возводятся в квадрат, суммируются по всему экспериментальному массиву и вычисляется их среднеквадратичная величина, являющаяся мерой отклонения расчетного профиля от экспериментального. Она принимается в качестве целевой функции F в процедуре минимизации, где варьируемыми параметрами являются величины r_0 и c .

В предварительных численных экспериментах выяснилось, что целевая функция $F(r_0, c)$ имеет форму сильно вытянутого «оврага», слегка изогнутая ось которого наклонена по отношению к осям координат. В центральной области, близкой к экстремуму, линии уровня F практически совпадают с эллипсами (рис. 4). На рис. 5 показано поведение F в малой окрестности, непосредственно примыкающей к экстремуму.

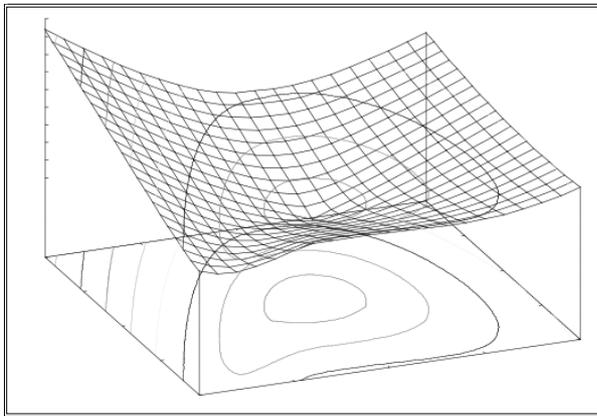


Рис. 4. Вид целевой функции F в области экстремума. Использована специальная система координат, оси которой совпадают с полуосями одного из эллипсов

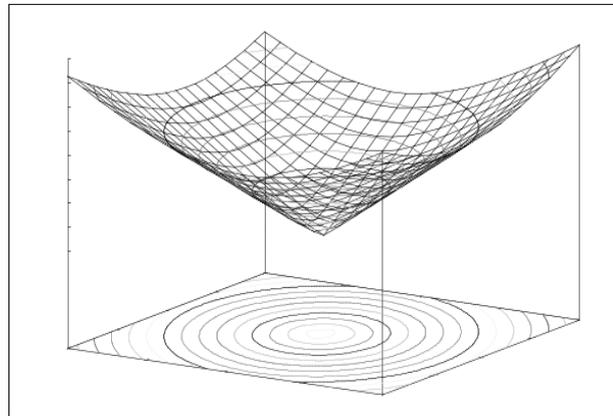


Рис. 5. Вид функции F в малой окрестности экстремума

Из этих рисунков видно, что целевая функция имеет ярко выраженный воронкообразный острый минимум. Его положение с высокой точностью можно определить стандартным методом Нелдера–Мида [2].

Работоспособность программы была проверена в численных экспериментах, где в качестве «экспериментального» профиля использовался расчетный, промодулированный гауссовым шумом с различной величиной дисперсии. Оказалось, что для вычисления коэффициента поверхностного натяжения с относительной погрешностью $\delta\sigma < 0,01\%$ программа примерно 200 раз обращается к вычислению целевой функции (и, следовательно, к интегрированию уравнения Лапласа). Обнаружена линейная связь между стандартным отклонением коэффициента поверхностного натяжения $S(\sigma)$ и дисперсией S_M в гауссовом распределении точек модельного профиля.

$$S(\sigma) \approx 5S_M.$$

При обработке фотографии капли приходится принимать во внимание, что кроме радиуса кривизны капли и коэффициента поверхностного натяжения жидкости, о которых мы уже говорили, неизвестными параметрами являются также координаты вершины капли x_0^*, y_0^* и возможный угол θ отклонения оси профиля капли от вертикали, связанный с неточной ориентацией фотокамеры. Эти три параметра могут быть определены в результате некоторой дополнительной обработки фотографии, и в этом случае они не входят в число варьируемых параметров целевой

функции, как и предполагалось выше. С другой стороны, если этого не сделано, мы можем считать и эти параметры варьируемыми, так что число аргументов целевой функции возрастет до пяти. Это означает, конечно, существенное увеличение объема вычислений.

Мы выполнили численный анализ точности определения коэффициента c в зависимости от числа и типа варьируемых параметров. На рис. 6 приведены его результаты. В случае (а) из числа варьируемых параметров исключены r_0 и угол θ , в случае (б) – r_0 , в (в) – θ , а в (г) – ни один из параметров не исключался.

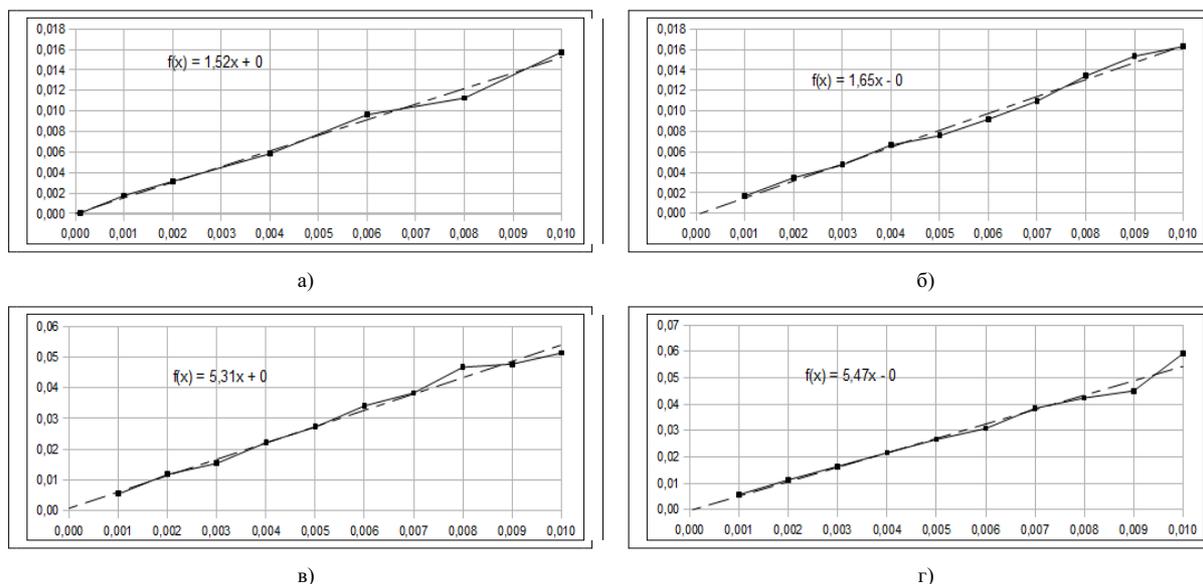


Рис. 6. Зависимости стандартного отклонения коэффициента поверхностного натяжения (мН/м) от стандартного отклонения точек расчетного и экспериментального профилей капли (мм) при различном выборе варьируемых параметров. Функция $f(x)$ – уравнение линейного тренда, показанного пунктиром

Видно, что во всех случаях, когда параметр r_0 исключен из числа варьируемых (то есть определен независимо из других экспериментов), ошибка в определении коэффициента поверхностного натяжения оказывается наименьшей. Об этом свидетельствует малая величина углового коэффициента функции $f(x)$, связывающей эту ошибку с (неизбежными) случайными ошибками в определении профиля капли. Этот коэффициент в случаях (рис. 6, а и б) в три с лишним раза меньше, чем в случаях (рис. 6, в и г). Исключение из числа варьируемых параметров угла θ мало помогает повышению точности результатов, что позволяет, в принципе, не слишком заботиться о точной ориентации фотокамеры, если этот параметр будет «включен» в процедуру обработки.

Таким образом, для повышения точности определения поверхностного натяжения желательно определить радиус кривизны капли в ее вершине независимым способом и также с высокой точностью. Для этого можно использовать методы интерферометрии, подобные рассмотренным нами в [3] для случая «лежащей» капли. На рис. 7 показана принципиальная схема возможной реализации этого метода. «Висячая» капля, показанная на рисунке, условно повернута на 90° против часовой стрелки. Луч света от когерентного источника подается на полупрозрачное зеркало (пунктирная линия). Часть света, прошедшая через полупрозрачное зеркало, отразившись от опорного зеркала и снова от полупрозрачного, формирует плоскую опорную волну, которая собирается линзой в фокусе и дальше распространяется в виде сферической волны с радиусом кривизны R_0 . Другая часть световой волны после отражения от полупрозрачного зеркала попадает на поверхность капли. Отраженный от нее свет распространяется в виде сферической (предметной) волны с центром в точке, находящейся на расстоянии $r_0/2$ от ее поверхности. Предметная волна собирается линзой в некоторой точке на оси и в плоскости изображения имеет радиус кривизны R .

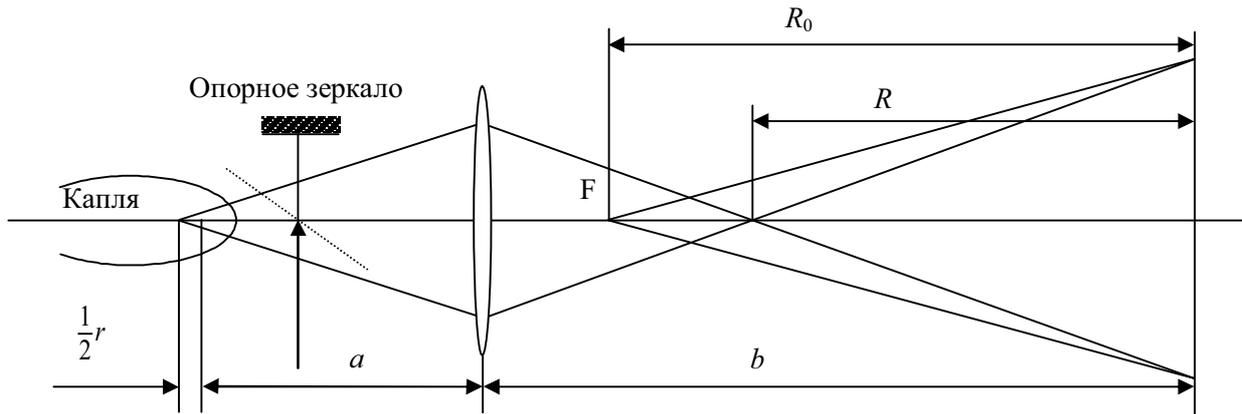


Рис. 7. Определение радиуса кривизны капли интерференционным методом

Опорная и предметная волны в плоскости изображения создают интерференционную картину, на основе анализа которой может быть определена с высокой точностью разность кривизн $|\Delta k|$ интерферирующих волн:

$$|\Delta k| = \left(\frac{1}{R} - \frac{1}{R_0} \right) = \frac{2\lambda(n-1)}{x_n^2 - x_1^2}, \quad (6)$$

где λ – длина волны света; n – номер светлой интерференционной полосы; x_i – координата центра соответствующей полосы.

Определив $|\Delta k|$ на основании несложного геометрического расчета, мы можем найти радиус кривизны поверхности капли r в ее вершине:

$$\frac{1}{2}r_0 = \frac{f^2}{\Delta k(b-f)^2} + \frac{fb}{b-f} - a, \quad (7)$$

где f – фокусное расстояние объектива. Формула (7) упрощается, если оптическая схема точно сфокусирована на вершине капли. В этом случае мы имеем $a = fb/(b-f)$. Следовательно, последние два слагаемых в формуле (7) взаимно уничтожаются. К сожалению, фокусировка не может быть осуществлена абсолютно точно и мы вынуждены записать, что $a = fb/(b-f) + \Delta a$, где Δa – погрешность определения расстояния от поверхности капли до объектива. Подставляя полученное выражение для a в формулу (7) и учитывая, что отношение $\frac{f}{(b-f)}$ равно масштабу изо-

бражения m (величина обратная коэффициенту поперечного увеличения оптической системы), мы приходим к выражению:

$$\frac{1}{2}r_0 = \frac{m^2}{\Delta k} + \Delta a. \quad (8)$$

Следовательно, радиус кривизны поверхности капли не может быть определен точнее, чем расстояние от вершины капли до объектива, а точное определение этого расстояния представляет собой самостоятельную сложную в техническом отношении задачу, подобную рассматриваемым нами в [3].

Заключение

Предложен метод компьютерной обработки цифрового изображения капли и расчета поверхностного натяжения по координатам ее профиля. Достоинством метода является учет всего профиля капли (до 10^4 точек на нем), а не отдельных его параметров. Методом компьютерного моделирования получена зависимость погрешности определения коэффициента поверхностного натяжения жидкости от ошибок в координатах профиля. Показано, что эта погрешность может быть существенно уменьшена, если известен радиус кривизны поверхности капли в ее вершине.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 10-03-00719-а.

Литература

1. Adams, J.C. An attempt to test the theories of capillary action / J.C. Adams. – Cambridge: Deighton, Bell and CO, 1883. – 60 p.
2. Банди, Б. Методы оптимизации. Вводный курс: пер. с англ / Б. Банди. – М: Радио и связь, 1988. – 128 с.
3. Определение радиуса кривизны в вершине лежащей капли по наблюдениям картин интерференции / Г.П. Пызин, В.Л. Ушаков, В.Г. Речкалов, В.П. Бескачко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2009. – Вып. 4. – № 22(155) – С. 91–96.

Поступила в редакцию 30 сентября 2010 г.

COMPUTER-DRIVEN PROCESSING OF THE LIQUID DROP SHAPE IMAGE FOR DETERMINATION OF SURFACE TENSION COEFFICIENT

We propose a method to improve the accuracy of measurement of surface tension of the liquid, using data on the shape of the free surface of the drop and technology of computer image processing.

Keywords: surface tension, liquid drop, drop shape, image processing.

Rechkalov Viktor Grigorevich is Cand. Sc. (Education), Associate Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

Речкалов Виктор Григорьевич – кандидат педагогических наук, доцент, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: viktor-rechkalov@mail.ru

Ryzin Georgii Petrovich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

Пызин Георгий Петрович – кандидат технических наук, доцент, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: hologrph@mail.ru

Ushacov Vladimir Leonidovich is Assistant Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

Ушаков Владимир Леонидович – ассистент, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

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

Бескачко Валерий Петрович – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра общей и теоретической физики, физический факультет, Южно-Уральский государственный университет.

e-mail: vestnik@physics.susu.ac.ru

КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОПИСАНИЮ ВОЗМОЖНОСТИ УСИЛЕНИЯ ИЗЛУЧЕНИЯ С ПОМОЩЬЮ КОНТИНУУМА НАНОТРУБОК

Н.Р. Садыков, Н.А. Скоркин

На основе квантового подхода показана возможность накачки среды, состоящей из нанотрубок. Накачка производится нестационарным электрическим полем, перпендикулярным к оси симметрии нанотрубки. Задача решается на основе теории свободных электронов и модели независимых электронов. Процесс математически промоделирован на основе системы материальных уравнений.

Ключевые слова: уравнение Шредингера, электромагнитное излучение, наночастицы, нестационарное электрическое поле.

Введение. Если в случае фуллеренов воспользоваться теорией свободных электронов (электроны не взаимодействуют с ионами) и моделью независимых электронов (электроны не взаимодействуют друг с другом), движение электронов в фуллеренах можно описать с помощью квантового подхода. В этом случае движение электронов в фуллерене можно считать аналогичным движению в потенциальном поле тонкого сферического слоя [1, 2]. Полная система ортогональных и нормированных одночастичных волновых функций в этом случае определяется из уравнения Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e R^2} \Delta_{\theta, \varphi} \Psi = (W - U_0) \Psi, \quad (1)$$

где $U_0 = \text{const}$, W – энергия, m_e – масса электрона.

Воспользуемся аналогичной моделью для описания процесса усиления излучения с помощью удлиненных нанотрубок. В данной работе на основе квантового подхода покажем возможность накачки среды, состоящей из нанотрубок. Накачку среды можно производить нестационарным электрическим полем, перпендикулярным к оси симметрии нанотрубки. Задачу будем решать на основе теории свободных электронов и модели независимых электронов. На основе системы материальных уравнений процесс усиления электромагнитного излучения математически промоделируем.

Нанотрубки представляют собой цилиндрические молекулы с нанометровым диаметром и нанометровой длиной [3–5]. Такое необычное сочетание масштабов длины и диаметра приводит к уникальным свойствам нанотрубок, одним из которых является возможность генерации СВЧ-излучения [6, 7]. Приступим к рассмотрению сформулированной задачи.

О возможности накачки среды с помощью нанотрубок нестационарным электрическим полем. При наличии оператора возмущения $\hat{V}(t)$ (наличие нестационарного электрического поля) в цилиндрической системе координат получим

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m_e R^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \Psi + (U_0 + \hat{V}(t)) \Psi, \quad \hat{V} = -eRE_0 \cos \varphi, \quad (2)$$

где E_0 – нестационарное электрическое поле, которое направлено перпендикулярно оси нанотрубки; R – радиус нанотрубки. В данной задаче волновая функция одночастичных стационарных состояний, в которых может находиться каждая из частиц, кроме магнитного квантового числа m , будет характеризоваться квантовым числом n за счет квантования в продольном направлении. При этом плотность энергетических уровней W_n за счет большой протяженности по сравнению с поперечными размерами нанотрубок будет значительно больше плотности энергетических уровней W_m . Для проведения оценок предположим, что переход из возбужденного состояния в невозбужденное осуществляется за счет изменения числа частиц в состояниях $\Psi_{n,m}$, $\Psi_{n,m+1}$, где волновая функция $\Psi_{n,m} = \Psi_m(\varphi) \chi_n(z)$.

Из уравнения (2) при отсутствии оператора возмущения полной системой ортогональных и нормированных одночастичных волновых функций будут функции:

$$\Psi_m = \frac{\cos(m\varphi)}{\sqrt{\pi}}, \quad W_m = \frac{\hbar^2 m^2}{2m_e R^2}, \quad (3)$$

где $m = 1, 2, 3, \dots$. При $m = 0$ имеем $\Psi_0 = \pi/2$.

Для проведения дальнейших оценок определим приближенно собственную функцию и собственное значение энергии в момент времени $t \rightarrow \infty$ для оператора возмущения в формуле (2) при выполнении условия $\hbar\Omega = W_m - W_{m-1} \sim |V_{m-1,m}|$. Для этого представим решение в виде линейной комбинации Ψ_m и Ψ_{m-1} , в результате в базисе двух собственных функций получим задачу на собственные значения энергии и собственные функции при наличии стационарного возмущения (задача может быть обобщена на случай большего числа собственных функций):

$$\Psi_{II} = C(\Psi_m + \kappa\Psi_{m-1}), \quad W_{II} = \tilde{W} + \beta, \quad \Psi_I = C(\Psi_{m-1} - \kappa^*\Psi_m), \quad W_I = \tilde{W} - \beta. \quad (4)$$

$$\kappa = \frac{V_{m-1,m}}{\hbar\Omega/2 + \beta}, \quad \beta = \left((\hbar\Omega/2)^2 + |V_{m-1,m}|^2 \right)^{1/2}, \quad V_{m-1,m} = \int_0^{2\pi} \Psi_{m-1}^* \hat{V} \Psi_m d\varphi, \quad (5)$$

где $C = \text{const}$.

Если предположить, что стационарное возмущение \hat{V} в точке $z = 0$ «мгновенно» включается при $t = 0$, то из нестационарного уравнения Шредингера (2) с учетом соотношений (4) и (5) получим

$$\Psi(t) = A\Psi_{II} \exp(-i\tilde{W}t/\hbar - i\beta t/\hbar) + B\Psi_I \exp(-i\tilde{W}t/\hbar + i\beta t/\hbar). \quad (6)$$

С учетом выражения (6) решение окончательно запишется в виде

$$\Psi(t) = \left[(A - \kappa^* B)\Psi_m + (B + \kappa A)\Psi_{m-1} \right] \cos(\beta t/\hbar) - \\ - i \left[(-B + \kappa A)\Psi_{m-1} + (A + \kappa^* B)\Psi_m \right] \sin(\beta t/\hbar) \exp(-i\omega t/2). \quad (7)$$

В соответствии с формулами (2) и (3) матричный элемент при $m \neq 1$ равен $V_{m-1,m} = -eRE_0/2$.

Предполагая, что при $t = 0$ вероятность распределения удовлетворяет распределению Больцмана, получим $\left| (A - \kappa^* B)/(B + \kappa A) \right|^2 = \exp(-2\beta/(kT)) = \alpha^2$.

При $m = 40$, $R = 10^{-8} \text{ м}$, $E_0 = 3 \cdot 10^6 \text{ В/м}$ получим $\hbar\Omega \approx 3,1 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$; $|V_{m-1,m}| = 1,5 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$; $\beta \approx 2,1 \cdot 10^{-2} \text{ эВ}$; $\kappa \approx 0,42$; $\alpha \approx 0,5$; $A \approx 1,16 \text{ В}$.

Следует отметить, что использование в качестве базисных функций только двух функций оправдано тем, что вероятность нахождения электрона в возбужденном состоянии при $\hbar\Omega = W_m - W_{m-1} \sim |V_{m-1,m}|$ в соответствии с распределением Больцмана при увеличении m быстро убывает. Для увеличения точности оценок можно было бы использовать три состояния W_{m-1}, W_m, W_{m+1} .

Из полученных оценок следует, что вероятность $|A|^2$ нахождения электрона в возбужденном состоянии W_+ больше вероятности $|B|^2$ электрона в состоянии W_- . Это означает, что рассматриваемая система оказывается возбужденной (накаченной ([3]) с величиной накачки $N = KZ_0(|A|^2 - |B|^2)$, где K – концентрация наночастиц, Z_0 – число свободных электронов, которые находятся в возбужденном состоянии (величина будет определена ниже).

Оценка коэффициента усиления в резонаторе. Из полученных выше результатов следует, что если в активной среде, состоящей из множества нанотрубок с определенной ориентацией (ось симметрии наночастицы перпендикулярна направлению нестационарного поля), будет происходить усиление излучения с частотой $\omega \approx 2\beta/\hbar$. Аналогичное усиление будет происходить и в резонаторе. Оценим коэффициент усиления в резонаторе.

В случае резонатора процесс усиления будет описываться с помощью уравнения для излучения E_z и системы двух материальных уравнений для поляризации P_z и величины населенности N ([8], с. 111)

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{E}}{\partial t} + \frac{1}{2\tau_c} \tilde{E} &= i \frac{\omega}{2\varepsilon\varepsilon_0} \tilde{P}, \quad \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{N - N_0}{T_1} = \frac{2}{\hbar} (\tilde{E}\tilde{P}^* - \tilde{P}\tilde{E}^*), \\ \frac{\partial \tilde{P}}{\partial t} + \left(\frac{1}{T_2} - i(\Omega - \omega) \right) \tilde{P} &= -i \frac{|d_{I,II}|^2}{3\hbar} N \tilde{E}, \end{aligned} \quad (8)$$

где $\omega = 2\beta/\hbar$; μ, μ_0 – соответственно электрическая проницаемость и электрическая постоянная; в уравнениях (8) в отличие от монографии [8] наличествует связь между индукцией и поляризацией $D_z = \varepsilon\varepsilon_0 E_z + P_z$. В уравнениях (8) введены обозначения (волновая функция Ψ введена формулой (6))

$$d_{I,II} = \int_0^{2\pi} \Psi_I^* (-eR \cos \varphi) \Psi_{II} d\varphi = -\frac{1 - \kappa^2}{1 + \kappa^2} \cdot \frac{eR}{2}. \quad (9)$$

Энергия одноуровневых состояний электрона (для m см. (3)), соответствующих стационарным состояниям одного электрона, в плоскости квантовых чисел n, m удовлетворяют условию

$$W_{n,m} = \frac{(2\pi\hbar)^2}{2m_e} \left(\frac{n^2}{L^2} + \frac{m^2}{(2\pi R)^2} \right) = W_{\max}. \quad (10)$$

Из соотношения (10) следует, что число энергетических уровней равно $M_1 = LRm_e W_{\max} / (4\hbar^2)$. Пусть расстояние между центрами атомов в нанотрубке $R_0 \approx 1,44 \cdot 10^{-10} m$. Тогда число атомов будет порядка $M_2 \approx 2\pi RL / R_0^2$. Поскольку число атомов равно числу свободных электронов, а число заполненных энергетических уровней в соответствии с принципом Паули примерно в два раза меньше свободных электронов, то получим $W_{\max} \approx 8\pi W_0$, $W_0 = \hbar^2 / (2m_e R_0^2) \approx 1,7 eV$. Рассмотрим уровни с $m = m_0 = 40$. В этом случае $\Delta W_m = W_m - W_{m-1} = \hbar^2 m_0 / (m_e R^2) \approx 0,03 eV$, где $R = 10^{-8} m$ (при этом максимальные значения квантовых чисел при $L = 10^{-7} m$ в соответствии с условием (10) будут $n_{\max} = \frac{1}{2\pi\hbar} (2m_e W_{\max} L^2)^{1/2} \approx 570$, $m_{\max} \approx 315$). При объемной доле наночастиц $c_0 = 10^{-2}$ концентрация наночастиц будет равна $K = c_0 / (\pi R^2 L) \approx 3 \cdot 10^{19}$.

Тогда при $Z_0 = 2$ инверсия населенностей $N = KZ_0 (|A|^2 - |B|^2) = 8,82 \cdot 10^{19} m^{-3}$. В рассматриваемой задаче в уравнениях (8) будет иметь место условие $\dot{P}_z \gg P_z / T_2$. Поэтому в уравнениях (8) при $\omega = \Omega$ в левой части для уравнения поляризации можно пренебречь слагаемым $\sim \tilde{P} / T_2$. В этом случае при $N = 8,82 \cdot 10^{19} m^{-3}$ из уравнений (8) по аналогии с работой [7] получим задачу на собственные значения для коэффициента усиления:

$$\Lambda = |d_{I,II}| \cdot [\omega N / (3\hbar\varepsilon_0)]^{1/2} \approx 5,3 \cdot 10^{11} c^{-1}.$$

Применительно к задаче усиления излучения коэффициент усиления будет порядка $\Gamma = c / \Lambda \sim 5,6 \cdot 10^{-4} m$, где длина волны $\lambda = 2\pi c / \omega \approx 4,0 \cdot 10^{-5} m$. Видно, что условие приближения медленно меняющейся амплитуды выполняется.

Из полученных результатов следует, что предположение медленно меняющейся амплитуды поля излучения действительно имеет место.

В качестве нестационарного поля, которое включается «мгновенно», можно использовать поле [10, 11] длительностью $\Delta t = 3 \cdot 10^{-9} c$, с шириной переднего фронта $\Delta T \approx 10^{-10} c$. Предварительно проведенные численные расчеты показывают, что для такого поля также имеет место процесс накачки среды для усиления излучения.

Математическое моделирование процесса усиления излучения. Достоверность утверждений о возможности усиления электромагнитного излучения в среде, насыщенной нанотрубками, в не-малой степени зависит от достоверности результатов решения системы уравнений (8).

Численные значения параметров, входящих в систему уравнений (8), в системе единиц SI имеют такие значения, что различие в коэффициентах уравнений (8) составляет величину $\sim 10^{50}$. Данное обстоятельство указывает на то, что система дифференциальных уравнений (8), по-видимому, принадлежит к классу сверхжестких дифференциальных уравнений.

По этой причине для численного решения системы (8) была предпринята попытка решить ее с помощью неявного метода Рунге–Кутты–Грина [9]. Этот метод представляет собой многошаговую численную процедуру 5-го порядка аппроксимации, использующую дифференцирование назад для вычисления матрицы Якоби. В том виде, в каком представлены уравнения (8), решение с помощью указанного численного метода получить не удалось.

После введения новой переменной $\Pi = \frac{\omega}{\varepsilon_0} \tilde{P}$ и перехода от системы единиц SI к другой сис-

теме единиц, учитывающей характерные масштабы времени и размеров данной задачи, а именно: за единицу времени принято 10^{-9} с, длины 10^{-9} м, массы 10^{-6} кг – решение системы уравнений (8) стало возможным. В качестве начальных условий для уравнений (8) задавались следующие значения: удельная энергия $W = 0,5\varepsilon_0 |\tilde{E}|^2 = 10^{-4}$ Дж/м³, населенности $N = 1,0 \cdot 10^{20}$ м⁻³ и $N_0 = 0,5 \cdot 10^{11}$ м⁻³, поляризация полагалась равной нулю. Расчеты проводились до момента времени $t = 3 \cdot 10^{-9}$ с, их результаты представлены на рис. 1–3. На рис. 1 (график с разрывом на оси абсцисс) приведены результаты расчетов энергии $W(t)$ физической системы по уравнениям (8). На начальном участке $0 \leq t \leq 1,5 \cdot 10^{-9}$ с график функции $W(t)$ имеет быстро осциллирующий характер.

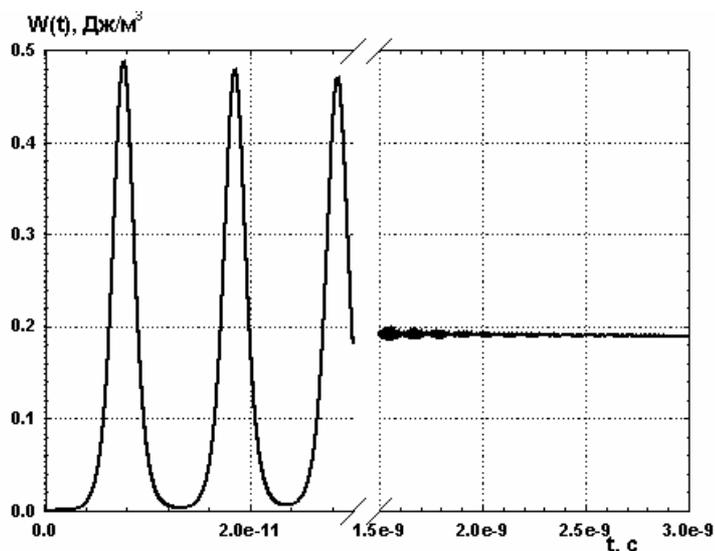


Рис. 1. Зависимость $W = W(t)$

Для выяснения вопроса о природе осцилляций, появляющихся у решений системы уравнений (8) данной работы: то ли они имеют физический смысл, то ли это паразитные колебания, обусловленные численным методом решения – был проведен следующий численный эксперимент. На отрезке $0 \leq t \leq 2,5 \cdot 10^{-11}$ с решались уравнения с шагами вычисления функций по времени Δt_1 и Δt_2 , отличающимися друг от друга в 1000 раз.

Если бы колебания функции имели паразитный характер, то графики функции $W(t)$ отличались бы для разных шагов Δt_1 и Δt_2 как по характеру осцилляций, так и по размаху колебаний. Результаты расчетов численного эксперимента приведены на рис. 2.

Рисунок показывает, что функции, рассчитанные на сильно отличающихся разностных сетках, совпадают вполне. Отсюда делается заключение о том, что колебательный характер поведе-

ния решения обусловлен физическим механизмом. Осциллирующий характер $N(t)$ и $W(t)$ объясняется взаимодействием излучения со средой, в соответствии с законом сохранения энергии. Интересно поведение функции населенности $N(t)$, представленной на рис. 3.

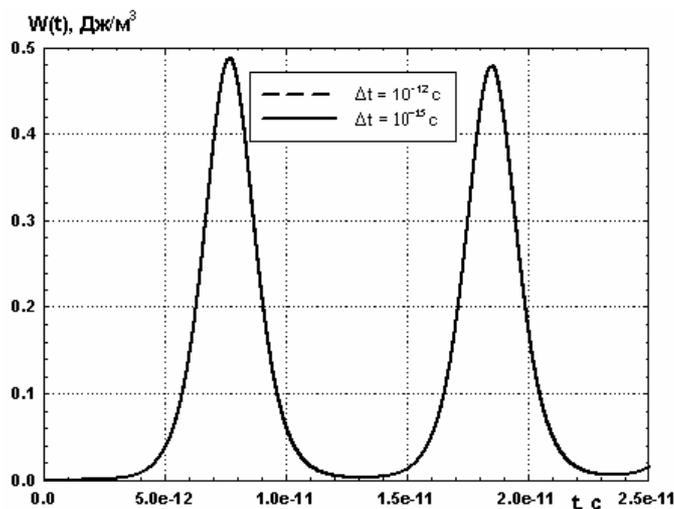


Рис. 2. Зависимость $W = W(t)$. Расчеты проводились с разными шагами по времени такими, что отношение $\Delta t_1/\Delta t_2 = 1000$

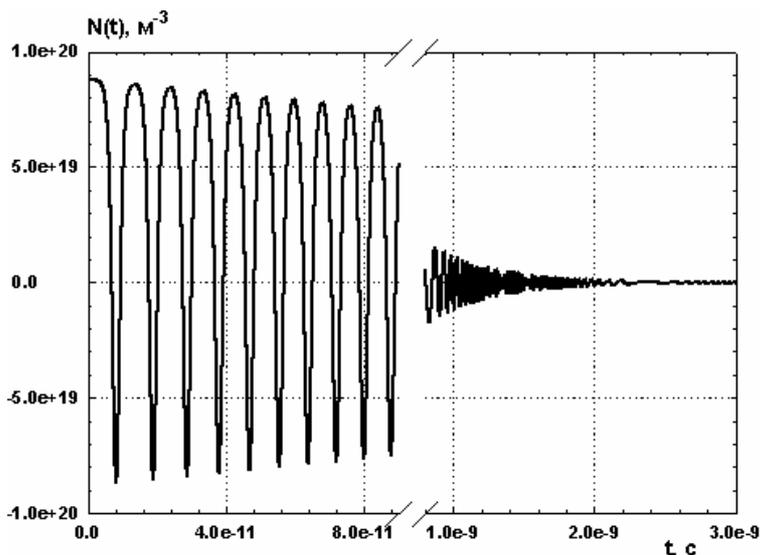


Рис. 3. Зависимость населенности от времени

Колебания происходят от отрицательных значений $N(t)$ до положительных, затухая по амплитуде с увеличением времени. И при значениях времени $t > 10^{-8}$ с населенность $N(t)$ устанавливается около значения $N_0 \sim 10^{11} \text{ м}^{-3}$. Объяснение механизма колебательного характера решения $N(t)$ системы уравнений (8) приведено выше.

Обсуждение результатов. В работе на основе квантового подхода теоретически показана возможность генерации излучения с длиной волны $\lambda \approx 4 \cdot 10^{-5} \text{ м} = 40 \text{ мкм}$ на основе удлиненных наночастиц с поперечной ориентацией оси симметрии относительно нестационарного поля. При $E_0 = 3 \cdot 10^4 \text{ В/м}$, $R = 10^{-8} \text{ м}$, $L = 10^{-7} \text{ м}$ и объемной доле частиц $c_0 = 10^{-2}$ плотность энергии генерируемого излучения $W \approx 0,2 \text{ Дж/м}^3$. Плотность генерации излучения можно увеличить в десятки раз, если линейные размеры уменьшить в несколько (например, в три раза). Но при этом величину нестационарного поля нужно увеличить в три раза ($RE_0 = \text{const}$).

Оценки показывают, что рассмотренный в работе подход можно обобщить на случай, когда нестационарное поле будет ориентировано вдоль оси наночастиц. В этом случае при длине наночастиц $L = 10^{-6} \text{ м}$ длина волны усиливаемого излучения будет порядка миллиметра. В такой постановке нужно будет использовать многоуровневую модель.

Авторы благодарят М.И. Яланина за помощь в подборе параметров квазистационарного поля; В.Г. Елецкого – за консультацию по нанотрубкам; А.Н. Еняшина – за консультацию по нанотрубкам и предоставленную литературу по данной тематике.

Работа выполнена по проекту РФФИ № 10-02-96012.

Литература

1. Gordon, J. Miller. Shell Structures in Molecular Orbital Energy Diagrams for “Small” Fullerene Cages: Free-Electron Versus Generator Orbital Models / J. Miller Gordon, G. John // *Journal of Mathematical Chemistry*. – V. 33, № 1. – 2003. – P. 55.
2. π -Molecular orbitals in fullerenes and the free electron model / Naomi Mizorogi, Masaki Kiuchi, Kumiko Tanaka *et al.* // *Chemical Physics*. – 2003. – V. 378 – P. 598.
3. Satio, R. Physical Properties of Carbon Nanotubes / R. Satio, G. Dresselhaus, M.S. Dresselhaus. – London: Imperial College Press, 1998. – 260 p.
4. Enyashin, A. Nanosized allotropes of molybdenum disulfide / A. Enyashin, S. Gemming, G. Seifert // *Eur. Phys. J. Special Topics*. – 2007. – V. 149. – P. 103–125.
5. Enyashin, A.N. Structure, stability and electronic properties of TiO_2 / A.N. Enyashin, G. Seifert // *Phys. Stat. Sol.(b)*. – 2005. – V. 242, № 7. – P. 1361–1370.
6. Кибис, О.В. Углеродные нанотрубки как терагерцовые излучатели нового типа / О.В. Кибис, М.Е. Портной // *Письма в ЖТФ*. – 2005. – Т. 31. – В. 15. – С. 85–88.
7. Садыков, Н.Р. Способ усиления СВЧ-излучения с помощью распыленных в газообразной среде нанотрубок / Н.Р. Садыков, Н.А. Скоркин // *Письма в ЖТФ*. – 2010. – Т. 36. – Вып. 17. – С. 69–78.
8. Пантел, Р. Основы квантовой электроники / Р. Пантел, М. Путхов. – М.: Мир, 1972. – 384 с.
9. Холл, Дж. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Дж. Холл, Дж. Уатт. – М.: Мир, 1979. – 312 с.
10. Месяц, Г.А. Пикосекундная электроника больших мощностей / Г.А. Месяц, М.И. Яланин // *УФН*. – 2005. – Т. 175, № 3. – С. 225.
11. Месяц, Г.А. Законы подобия в импульсных газовых разрядах / Г.А. Месяц // *УФН*. – 2006. – Т. 176, № 10. – С. 1069–1091.

Поступила в редакцию 8 марта 2010 г.

QUANTUM-MECHANICAL APPROACH TO DESCRIPTION OF THE POSSIBILITY OF THE REINFORCEMENT OF THE RADIATION BY MEANS OF CONTINUUM NANOTUBES

On base of the quantum approach is shown possibility of the pumping the ambience, consisting of nanotubes. Pumping is produced using non-stationary electric field perpendicular to axis of the symmetries nanotubes. The Problem dares on base of the theories free electron and models independent electron. The Mathematical modeling of the process is realized on base of the system of the material equations.

Keywords: Shredinger's equation, electromagnetic radiation, nanotubes, non-stationary electric field.

Sadykov Nail Rahmatullovich is Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Snezhinsk institute of physics and technology – branch of National Research Nuclear University «МЕРНИ», Snezhinsk.

Садыков Наиль Рахматуллович – доктор физико-математических наук, профессор, Снежинский физико-технический институт – филиал НИЯУ МИФИ, г. Снежинск.

Scorkin Nikolai Andreevich is Dr. Sc. (Engineering), Professor, Snezhinsk institute of physics and technology – branch of National Research Nuclear University “МЕРНИ”, Snezhinsk.

Скоркин Николай Андреевич – доктор технических наук, профессор, Снежинский физико-технический институт – филиал НИЯУ МИФИ, г. Снежинск.

e-mail: n.a.scorkin@rambler.ru

ОЦЕНКА ПАРАМЕТРОВ ИНТЕРФЕРОГРАММ, НЕОБХОДИМЫХ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ РАДИУСА КРИВИЗНЫ В ВЕРШИНЕ ЛЕЖАЩЕЙ КАПЛИ

В.Л. Ушаков, Г.П. Пызин, В.Г. Речкалов, В.П. Бескачко

В связи с развитием предложенного ранее способа определения параметров формы испаряющейся капли рассмотрены методы обработки интерференционной картины, возникающей при наложении плоского волнового поля и сферического поля, сформированного вершиной лежащей капли. Целью этих методов является повышение точности и надежности оценок параметров оптической схемы, ответственных за определение радиуса кривизны капли в ее вершине. Предложен метод обработки картины, оперирующий со всей информацией, представленной на цифровой копии интерферограммы, и показано его преимущество в сравнении с локальными методами, оперирующими только с частью такой информации.

Ключевые слова: измерение поверхностного натяжения, параметры формы капли, оптические методы, интерференционная картина.

Введение

Метод «лежащей» капли широко применяется для определения поверхностного натяжения агрессивных жидкостей, таких как высокотемпературные металлические расплавы [1]. Для этого используются геометрические параметры капли, оцениваемые по ее фотографическому или цифровому изображению. Обычно в качестве таких параметров берутся размер экватора капли и расстояние от него до ее вершины. Определение положения экватора капли затруднительно из-за того, что в районе экватора радиус капли слабо зависит от расстояния до вершины, что обуславливает погрешности в определении этого расстояния и как следствие – погрешности в определении величины поверхностного натяжения. Кроме того, требование наличия у капли экватора сужает возможность экспериментировать с разными жидкостями, помещенными на различные подложки. Поэтому представляет интерес рассмотреть другой набор геометрических параметров капли, который можно было бы использовать для решения той же задачи с большей точностью.

В работе [2] нами был предложен способ наблюдения за формой капли в окрестности ее вершины, отличающийся высокой пространственной чувствительностью и безинерционностью. Здесь вершина капли участвует в формировании интерференционной картины, параметры которой существенно зависят от радиуса ее кривизны. Расшифровка цифровой копии интерферограммы имеет, однако, свои трудности, связанные с присутствием на ней кроме полезной информации также и разного рода случайных возмущений, например, спекл-шума, шума, вызванного дифракцией света на пылинках, лежащих на поверхности элементов оптической схемы, и т.п. Это ставит вопрос о разработке таких методов оценки параметров интерференционной картины, необходимых для реализации метода [2], которые были бы устойчивы по отношению к этим возмущениям и обеспечивали бы достаточную точность результатов. В настоящем сообщении описывается несколько подходов к обработке зашумленных интерферограмм. Рассмотрены также некоторые аспекты повышения точности определения радиуса кривизны в вершине капли за счет изменения оптической схемы и методики эксперимента [2].

Эксперимент

Лежащая капля жидкости является оптическим объектом с фазовой отражающей поверхностью. Поставим задачу определить радиус кривизны R в вершине испаряющейся лежащей капли в любой момент времени в процессе ее испарения. Знание этого радиуса позволит совместно с численным решением уравнения Лапласа и нахождением одной из координат профиля капли определить величину силы поверхностного натяжения жидкости капли.

Неразведенный вертикальный луч лазера, отразившись от вершины осесимметричной лежащей (или висящей) капли, трансформируется в сферическое волновое поле, поскольку в окрестности вершины поверхность капли является сферической. Это волновое поле можно представить как поле, сформированное точечным источником света, расположенным на расстоянии $R/2$ за по-

верхностью вершины капли. Если это волновое поле наложить на когерентное ему плоское волновое поле, возникнет интерференционная картина, несущая информацию о радиусе кривизны капли. Схема данного эксперимента, подробно рассмотренного в работе [2], приведена на рис. 1. Здесь H – расстояние от подложки, на которой лежит капля, до фокальной плоскости объектива, B – расстояние от фокальной плоскости объектива до ПЗС матрицы, которая регистрирует интерферограмму, h – высота капли, f – длина фокусного расстояния объектива. Отметим, что линза, отражением от поверхности которой создается опорное поле, таким образом позиционирована по отношению к объективу, что формирует на ПЗС матрице плоское волновое поле.

На рис. 2. приведена расчетная схема эксперимента, позволяющего на основе известных соотношений интерферометрии и геометрической оптики выразить величину R через метрические параметры оптической схемы.

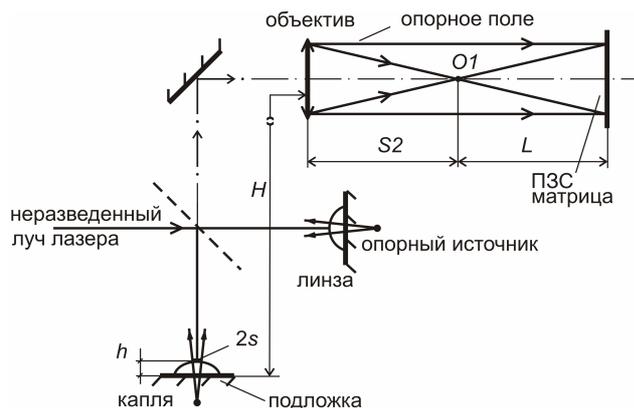


Рис. 1. Схема эксперимента

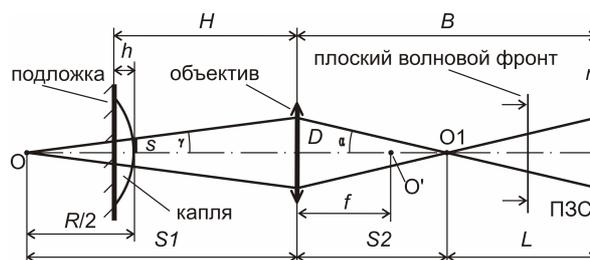


Рис. 2. Расчетная схема

Анализ расчетной схемы приводит к следующему выражению для R через геометрические параметры установки:

$$R = \frac{2}{\frac{1}{f} - \frac{1}{B-L}} + 2h - 2H. \quad (1)$$

Величины H и B в (1) необходимо найти экспериментально. Покажем, как это можно сделать.

Если на подложку вместо капли поочередно установить две плоско-выпуклые линзы с известными радиусами кривизны R_1 и R_2 и толщинами h_1 и h_2 , для которых расстояния от перетяжки O_1 до места расположения ПЗС матрицы будут равны L_1 и L_2 , тогда применение соотношения (1) для каждого из этих расположений приводит к следующей системе уравнений для определения неизвестных B и H :

$$\begin{cases} R_1 = \frac{2}{\frac{1}{f} - \frac{1}{B-L_1}} + 2h_1 - 2H \\ R_2 = \frac{2}{\frac{1}{f} - \frac{1}{B-L_2}} + 2h_2 - 2H \end{cases}. \quad (2)$$

Таким образом, задача сводится к нахождению значений L , L_1 и L_2 . Для этого вновь обратимся к рис. 2. Можно видеть, что в плоскости ПЗС-матрицы интерферируют два волновых поля: плоское волновое поле, сформированное опорным источником (рис. 1), и сферическое волновое поле, сформированное точечным источником, расположенным в точке O_1 . Картина интерференции представляет собой систему чередующихся светлых и темных колец (колец Ньютона). Пусть r – расстояние от центра интерферограммы до точки наблюдения в плоскости ПЗС матрицы. В случае, когда в центре интерферограммы ($r = 0$) оптическая разность хода Δ_0 плоского и сферического волновых фронтов равна нулю, можно записать

$$\Delta = r^2/2L, \quad (3)$$

где Δ – оптическая разность хода в точке наблюдения.

Для светлых колец на интерферограмме можно записать $\Delta = N \cdot \lambda$, где N – номер кольца, λ – длина волны лазера. Тогда из равенства (3) получим

$$L = \frac{r^2}{2 \cdot N \cdot \lambda}. \quad (4)$$

Таким образом, определив по интерферограмме радиусы светлых колец, можно найти искомый параметр L . Аналогичным образом можно получить значение L , используя темные кольца, для которых $\Delta = (2 \cdot N - 1) \frac{\lambda}{2}$, где $N = 1, 2, 3, \dots$

В экспериментах использовался объектив «Индустар-37» с фокусным расстоянием $f = 300$ мм и лазер ЛГН-215 с длиной волны $\lambda = 0,6328$ мкм. Размер ПЗС-матрицы составлял 6,7 x 5,0 мм, параметры H и B были около 360 и 3100 мм соответственно. Для этих условий оценка размера $2s$ области около вершины капли, участвующей в формировании картины интерференции (см. рис. 1, 2), дает $2s \sim 150 \div 300$ мкм. Это оправдывает высказанное выше предположение о сферичности поверхности капли вблизи ее вершины. Более подробно с проведением экспериментов можно ознакомиться в работе [2].

Параметры интерферограммы

Метод определения L , основанный на измерении радиуса колец и использовании соотношения (4), использовался нами ранее в экспериментах [2]. Однако, наблюдаемые на опыте интерферограммы (см. ниже рис. 3) имеют такой вид, что вопрос о том, как определять радиус кольца, не является праздным. При выбранном способе регистрации (ПЗС-матрица) этот вопрос, очевидно, останется даже в отсутствие обсуждавшихся выше шумов – как следствие дискретизации поля изображения и интенсивности света в каждой точке этого поля (пикселе). Поэтому оценка параметров картины интерференции (например, радиусов колец) вряд ли может быть сделана с высокой точностью, если опираться на какой-либо локальный метод обработки, оперирующий лишь с отдельными элементами картины. Более целесообразными представляются глобальные способы обработки, оперирующие со всей информацией, представленной на цифровом образе интерферограммы. Ниже описываются методы, использованные нами.

Для обработки интерферограммы необходимо оценить положение ее геометрического центра. По аналогии с методом определения центра масс тела в механике с использованием статических моментов инерции будем рассматривать интерферограмму как совокупность точек, имеющих «массу», пропорциональную их интенсивности. Тогда положение X_C, Y_C центра (инерции) интерферограммы можно определить как

$$X_C = \frac{\sum_i^N \sum_j^M (x_{i,j} \cdot I_{i,j})}{\sum_i^N \sum_j^M I_{i,j}}, \quad Y_C = \frac{\sum_i^N \sum_j^M (y_{i,j} \cdot I_{i,j})}{\sum_i^N \sum_j^M I_{i,j}}, \quad (5)$$

где $x_{i,j}, y_{i,j}$ есть координаты пикселя (i, j) цифровой копии интерферограммы, $I_{i,j}$ – значение этого пикселя (интенсивность света в месте его расположения). После этого можно рассмотреть некоторый луч, исходящий из центра интерферограммы, и построить распределение интенсивности света вдоль этого луча. Затем это распределение следует усреднить по направлениям всевозможных лучей, исходящих из центра и определить места (расстояния до центра), где интенсивность достигает максимумов (минимумов). Эти расстояния будут радиусами светлых (темных) колец, необходимыми для определения L с использованием формулы (4). Оказалось, однако, что хотя такой метод и работоспособен, но не слишком устойчив из-за того, что световой поток, проходящий на эквивалентные друг другу участки интерферограммы (то есть, находящиеся в одинаковом положении по отношению к ее центру), различен. Причин для этого может быть несколько, какая из них играет роль в данном случае – пока не ясно. Понятно только, что при неравномерном распределении «фона» по ПЗС матрице положение центра интерференционной картины, определяемое по (5), будет зависеть от вида этого (неконтролируемого) распределения.

Второй подход к решению задачи определения радиусов колец состоял в том, что предварительно задавалась система концентрических окружностей с центром, примерно соответствующим центру интерферограммы, и радиусами, разность квадратов величин которых была постоянной для соседних окружностей. Определялась и суммировалась интенсивность света экспериментальной интерферограммы во всех точках этих окружностей. Затем с использованием метода Нелдера–Мида [3] выполнялся поиск таких радиусов окружностей и положения их центра, которые обеспечивают минимальное значение этой суммарной интенсивности, если разыскиваются радиусы темных колец, и максимальную суммарную интенсивность – для светлых колец. При апробации этого подхода на практике оказалось, что он также ведет к не вполне устойчивым результатам из-за большой пологости оптимизируемой целевой функции в области разыскиваемых экстремумов.

Анализ полученных результатов привел нас к выводу, что желательно использовать данные о распределении интенсивности света, предоставляемые всем полем интерферограммы. С целью определения ее параметров предлагается составить и минимизировать целевую функцию Z , представляющую собой уклонение расчетной ($I_{i,j}^M$) интенсивности света, вычисленной с использованием математической модели интерференции, от интенсивности, наблюдаемой в эксперименте ($I_{i,j}^{\Delta}$):

$$Z = \sum_i \sum_j |I_{i,j}^{\Delta} - I_{i,j}^M|, \quad (6)$$

где i и j – координаты пикселей на цифровом изображении интерферограммы. Математическая модель опирается на законы интерференции плоского и сферического когерентных волновых полей, учитывает положение центра (X_C, Y_C) интерферограммы, ее среднюю (I_0) и минимальную (ΔI) интенсивности, разницу фаз φ_0 плоского и сферического волновых полей в центре интерферограммы:

$$I_{i,j}^M = ((I_0 - \Delta I) \cdot (1 + \cos(\frac{\pi \cdot ((i - Y_C)^2 + (j - X_C)^2)}{\lambda \cdot L} + \varphi_0)) + \Delta I) \cdot e^{-A \cdot r}. \quad (7)$$

Экспоненциальный множитель с показателем A описывает, если необходимо, уменьшение интенсивности от центра к краям интерферограммы. Заметим, что в предлагаемом подходе нет нужды определять радиусы колец непосредственно: искомый параметр L оптической схемы находится в процессе минимизации (6), осуществляемом методом Нелдера–Мида [3], как и выше.

Метод (6), (7) был реализован в виде программы с графическим интерфейсом. На рис. 3 в качестве примера приведена экранная копия рабочего окна этой программы. Слева приведено цифровое изображение интерферограммы, наблюдаемой в эксперименте, справа – результат его обработки с использованием модели (7). Для проверки работоспособности метода были выполнены эксперименты, в которых на место исследуемой капли ставились линзы с известными радиусами кривизны $R_{\text{эталон}}$ (эталонные). Результаты ($R_{\text{эксн}}$) оценки этих радиусов описанным методом, включающим определение параметра L с помощью (6) и (7), приведены в таблице. Погрешность в определении $R_{\text{эксн}}$ соответствует доверительной вероятности 95 %. Выполненные расчеты показали, что в отношении искомого параметра L предложенная методика дает устойчивые результаты: разброс L при повторении опытов составляет около 0,1 % при $L \approx 1000$ мм и около 0,06 % при $L \approx 1400$ мм.

№ опыта	$R_{\text{эксн}}$, мм	$R_{\text{эталон}}$, мм
1	$20,66 \pm 0,34$	20, 7
2	$7,88 \pm 0,28$	7,85

Заметим, что теперь достижимая точность определения L более чем порядок превосходит погрешность определения непосредственно интересующей нас величины $R_{\text{эксн}}$. Это связано с тем, что необходимые для расчета $R_{\text{эксн}}$ параметры H и B оптической схемы находятся из системы (2), содержащей радиусы кривизны $R_{1,2}$ эталонных линз, которые также имеют некоторую погрешность. Поэтому для повышения точности экспериментов необходимо либо предпринять специальные меры для уменьшения этой погрешности, либо найти другой, более точный способ

определения обоих параметров H и B или хотя бы одного из них. Укажем один из возможных способов.

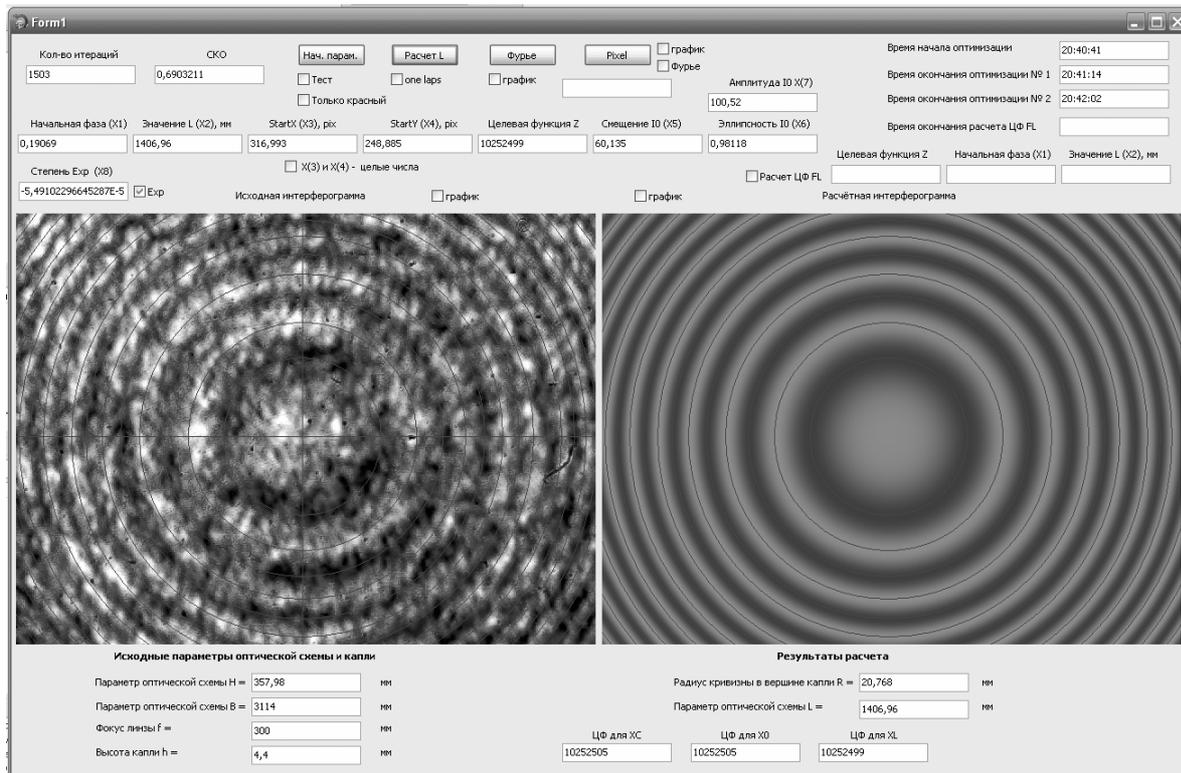


Рис. 3. Рабочее окно программы, реализующей метод (6)–(7) оценки параметров интерферограммы

Если вместо капли на подложку (см. рис. 1) установить плоскопараллельную пластинку, то после отражения от нее луча лазера волновое поле останется плоским. Пройдя через объектив, это поле трансформируется в сферическое и сойдется в точке O' – фокусе объектива (см. рис. 4 с эквивалентной схемой). Тогда

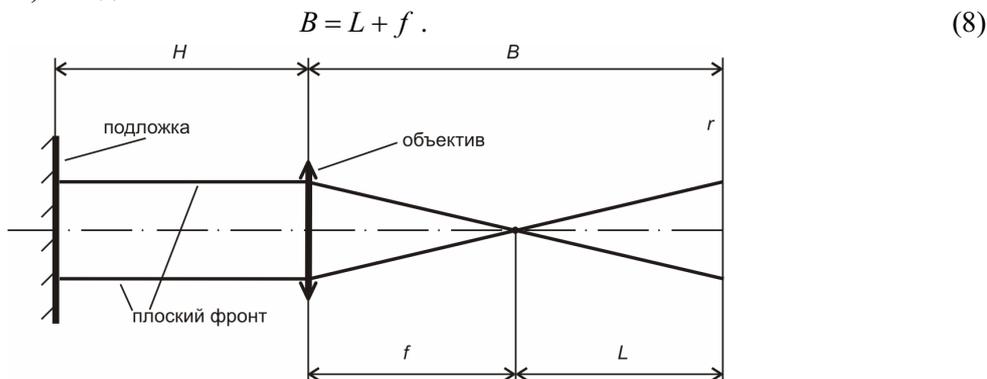


Рис. 4. К расчету параметра B

Таким образом, чтобы найти B , достаточно определить L , что можно сделать одним из методов, описанных только что. Второй неизвестный параметр, H , приходится, к сожалению, определять с помощью эталонной линзы:

$$H = \frac{1}{\frac{1}{f} - \frac{1}{B-L}} + h - \frac{R}{2}, \quad (9)$$

С использованием этого метода радиус кривизны эталонной линзы, использованной в тестовом опыте 1 (см. таблицу), теперь оценивается как $20,7 \pm 0,10$ мм.

Заключение

С целью определения параметров, необходимых для расчета радиуса кривизны в вершине лежащей капли предложенным ранее методом [2], рассмотрены локальные и глобальные методы

обработки цифровых копий интерферограмм, возмущенных шумами различного происхождения. Показано, что локальные методы, основанные на анализе отдельных элементов интерференционной картины (темных или светлых колец), менее устойчивы к возмущениям, чем глобальный метод, учитывающий распределение интенсивности на картине интерференции в целом. Предложены некоторые изменения в методике выполнения экспериментов, ведущие к повышению их точности.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 10-03-00719-а.

Литература

1. Физико-химические методы исследования металлургических процессов / С.И. Филиппов, П.П. Арсентьев, В.В. Яковлев, М.Г. Крашенинников. – М.: Металлургия, 1968. – 551 с.
2. Пызин, Г.П. Определение радиуса кривизны в вершине лежащей капли по наблюдениям картин интерференции / В.Л. Ушаков, В.Г. Речкалов, В.П. Бескачко // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2009. – Вып. 4. – № 22(155) – С. 91–96.
3. Химмельблау, Д. Прикладное нелинейное программирование / Д. Химмельблау. – М.: МИР, 1975. – 536 с.

Поступила в редакцию 30 сентября 2010 г.

THE INTERFEROGRAM PARAMETERS EVALUATION REQUIRED FOR THE CURVATURE RADIUS DETERMINATION AT THE TOP OF THE SESSILE DROP

In connection with the development of the previously suggested method for the evaporating drop's shape's parameters's determination we investigated the methods of processing the interference pattern that arises when applying the flat field and a spherical wave field, generated by vertex sessile drop. The aim of these methods is to increase the accuracy and reliability of the estimated optical system's parameters responsible for determining the radius of the curvature of the drop in its top. The processing picture method is introduced. It operates with all the information presented on a digital copy of the interferogram, and shows its advantage compared to local methods those operate only with a part of such information.

Keywords: interface tension measurements, drop shape parameters, optical methods, interference pattern.

Ushacov Vladimir Leonidovich is Assistant Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

Ушаков Владимир Леонидович – ассистент, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.

Pyzin Georgii Petrovich is Cand. Sc. (Engineering), Associate Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

Пызин Георгий Петрович – кандидат технических наук, доцент, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.
e-mail: holograph@mail.ru

Rechkalov Viktor Grigorevich is Cand. Sc. (Education), Associate Professor, General and Theoretical Physics Department, South Ural State University.

Речкалов Виктор Григорьевич – кандидат педагогических наук, доцент, кафедра общей и теоретической физики, Южно-Уральский государственный университет.
e-mail: viktor-rechkalov@mail.ru

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

Бескачко Валерий Петрович – профессор, доктор физико-математических наук, кафедра общей и теоретической физики, физический факультет, Южно-Уральский государственный университет.
e-mail: vestnik@physics.susu.ac.ru

ФОРМИРОВАНИЕ КРИСТАЛЛОВ СИСТЕМ $\text{NH}_4\text{Cl}+\text{H}_2\text{O}$ И $\text{NH}_4\text{Cl}+\text{CuSO}_4+\text{H}_2\text{O}$

А.В. Фокин, А.Н. Брызгалов, П.В. Волков

Экспериментально исследованы закономерности формирования кристаллов систем $\text{NH}_4\text{Cl}+\text{H}_2\text{O}$ и $\text{NH}_4\text{Cl}+\text{CuSO}_4+\text{H}_2\text{O}$. Выявлен переход кристаллов дендритной формы к ограниченной путем замещения ионов $(\text{NH}_4)^+$ на Cu^{2+} .

Ключевые слова: кристалл, фрактал, кластер, мономер, размерности евклидовой и фрактальной.

Введение

Среди множества кристаллов разной формы встречаются дендритные, обладающие высокой чувствительностью к воздействию среды. В данном случае рассматриваются кристаллы хлористого аммония с разветвленной дендритной формой при введении примесей двухвалентных ионов системы железа. По вопросу механизмов формирования указанных кристаллов имеются неоднозначные мнения. Для решения данного вопроса в кристаллы дендритной формы вводятся ионы двухвалентной меди Cu^{2+} , посредством которой изменяется структура и их физические свойства.

Из кристаллов дендритной формы следует выделить фрактальные кристаллические структуры. Теория фрактальной геометрии создана Бенуа Мандельбротом [1], в основу которой положены уравнения с параметрами фрактальной и евклидовой геометрии.

Термодинамический закон формирования ограниченных кристаллов определяется уравнением Кюри–Вульфа

$$\sum \sigma_i S_i = \min ,$$

где σ_i – удельная поверхностная энергия, S_i – площадь i -й грани.

В процессе роста кристалл ограничивается плоскостями с минимальной поверхностной энергией, а при достижении равновесия относительно среды определяется уравнением

$$\sum \sigma_i S_i = 0 .$$

Дендритные кристаллы фрактальной формы составлены из элементов подобных себе и формируются из кластера. По мере роста они разветвляются, суммарная площадь поверхности и энергия увеличиваются, а плотность уменьшается (рис. 1):

$$\rho(r) \sim R_0^{-D} r^{D-E} , \quad (1)$$

где $\rho(r)$ – плотность кластера, R_0 – радиус мономера, r – радиус кластера, E , D – евклидовая и фрактальная размерности соответственно. Параметр E для ограниченных кристаллов определяется целым числом, а D – для фрактальных кристаллов дробным числом.

В данной работе возможность перехода фрактального кристалла в ограниченный представлена экспериментально.

Эксперимент

Кристаллы системы $\text{NH}_4\text{Cl}+\text{H}_2\text{O}$ (рис. 2) получены из раствора путем испарения [2]. Ветви кристаллов в капле раствора распространяются от края к центру в направлении градиента концентрации. Имеются основные ветви с боковыми побегам.

На рис. 3 представлена элементарная ячейка кристалла NH_4Cl кубической симметрии. В центре располагается ион NH_4 , в четырех вершинах ионы хлора [3]. Ионы хлора соединяются с ионами азота через водородные связи. В направлении больших диагоналей куба распространяются

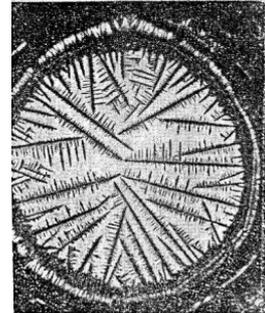


Рис. 1. Завершение кристаллизации NH_4Cl

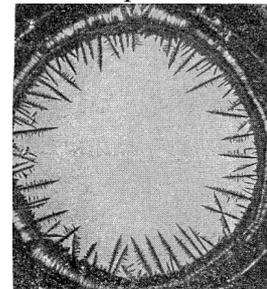


Рис. 2. Начало кристаллизации NH_4Cl

основные ветви кристалла с боковыми поверхностями под углом 89° . Для определения фрактального параметра D использовался клеточный метод: от центрального кластера проводились дуги с возрастающим радиусом до конца кристалла. В выделенных участках определялась плотность элементов кристалла. Плотность ветвей с удалением от центра уменьшалась в зависимости от концентрации примеси CuSO_4 . Для кристалла без примесей $D \sim 1,52 \pm 0,18$. Согласно дробному значению параметра D , полученный дендрит является фрактальным, к которому можно применить формулы фрактальной геометрии.

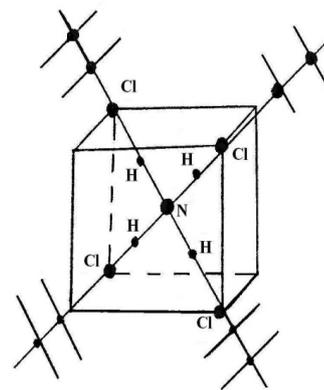
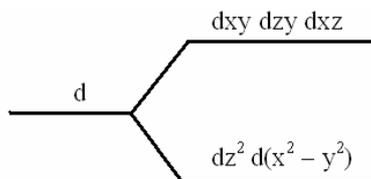


Рис. 3. Элементарная ячейка кристалла NH_4Cl кубической симметрии

Формирование кристаллов в системе $\text{NH}_4\text{Cl} + \text{CuSO}_4 + \text{H}_2\text{O}$

Ион NH_4Cl имеет тетраэдрическую координацию согласно sp^3 -гибридизации электронных оболочек, что определяет положение окружающих его ионов Cl (рис. 3). В растворе CuSO_4 разделяется на ионы Cu^{2+} и SO_4^{2-} . Ионы Cu^{2+} замещают ионы NH_4^+ в тетраэдрической координации при расщеплении d-уровней иона Cu^{2+} в кристаллическом поле по схеме:



При этом несколько изменяются положения ионов Cl и ветвей дендритов в ячейке.

Результаты эксперимента

1. Изменения параметра D с концентрацией примесей ионов CuSO_4 (см. таблицу) рассчитываются по формуле (2), полученной из формулы (1):

$$D = E + \frac{r\Delta\rho}{\Delta r\rho} \tag{2}$$

Зависимость фрактального параметра от концентрации CuSO_4	
C_{CuSO_4} , г/см ³	D
0,000	1,52±0,18
0,080	1,89±0,02
0,100	1,97±0,05

По мере увеличения концентрации раствора возрастает параметр D и приближается к E , который равен 2.

2. С повышением концентрации изменяется угол α между основными и боковыми ветвями дендрита от 89° до 71° (участок от 0 до 0,08). На рис. 4 представлен график зависимости $\sin \alpha$ от концентрации примесей C .

В дальнейшем происходит увеличение плотности ρ , и при 0,1 г/см³ наблюдаем плотную скелетную структуру дендрита (рис. 5), затем – мономеры (рис. 6).

На участке от 0,15 до 2 проявляется переход к ограненным кристаллам одной из кубической сингонии (рис. 7).

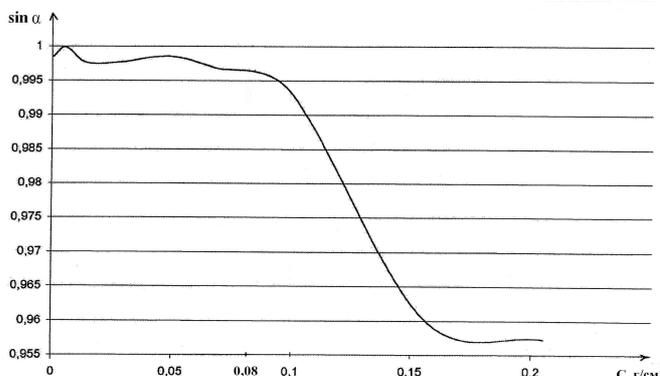


Рис. 4. Зависимость синуса угла между ветвями дендрита от концентрации примеси CuSO_4

Системы $\text{NH}_4\text{Cl}+\text{CuSO}_4+\text{H}_2\text{O}$ представляют собой твердый раствор примеси Cu^{2+} в NH_4Cl



Рис. 5. Скелетная структура хлористого аммония, концентрация примеси 0,1 г/см³



Рис. 6. Мономер хлористого аммония при концентрации примеси 0,15 г/см³

Выводы

1. Рассмотрена структура и закономерности формирования дендритных кристаллов в системе $\text{NH}_4\text{Cl}+\text{H}_2\text{O}$. Установлено, что дендритные кристаллы этой системы относятся к фрактальным.

2. Экспериментально показано, что в системе $\text{NH}_4\text{Cl}+\text{CuSO}_4+\text{H}_2\text{O}$ происходит замещение центрального иона NH_4^+ на ион Cu^{2+} .

3. По мере увеличения концентрации Cu^{2+} в полученном твердом растворе меняется решетка кристалла, начиная с углов между дендритами, увеличивается плотность дендритов и постепенно фрактальный параметр D из дробного приближается к целому евклидовому E .

4. Согласно уравнению Мандельброта и экспериментальным результатам, представленным на графике (рис. 4), наблюдаем последовательное преобразование дендритного кристалла в ограниченный.



Рис. 7. Кристалл хлористого аммония при концентрации примеси 0,2 г/см³

Литература

1. Mandelbrot, B. The Fractal Geometry of Nature / B. Mandelbrot. – N.-Y.: 1980. – 237 p.
2. Vassell, M. Electro-Optic Effect in NH_4Cl / M. Vassell, E. Conwell // Phys. Rev. – 1965. – V. 140. – A2110.
3. Зарипов, М.М. Изменение ближайшего окружения ионов Cu^{2+} от концентрации в NH_4Cl / М.М. Зарипов, Г.К. Чиркин, Л.А. Щербакова // Кристаллография. – 1966. – Москва. – С. 457–459.

Поступила в редакцию 2 марта 2010 г.

**THE FORMATION OF CRYSTAL OF SYSTEMS
NH₄CL+H₂O AND NH₄CL+CuSO₄+H₂O**

The regularities of formation of crystal of systems NH₄Cl+H₂O and NH₄Cl+CuSO₄+H₂O are experimentally researched. The transition of the crystals of dendritic shape to bounded one crystals by means of replacement of ions (NH₄)⁺ by Cu²⁺ is revealed.

Keywords: crystal, fractal, cluster, monomer, euclidian dimension and fractal dimension.

Fokin Andrey Vladimirovich is Head of the Experimental Physics Department of the lycée № 31.

Фокин Андрей Владимирович – заведующий кафедрой экспериментальной физики лицея № 31.

Bryzgalov Alexandr Nikolaevich is Dr.Sc. (Physics and Mathematics), Professor, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

Брызгалов Александр Николаевич – доктор физико-математических наук, профессор, кафедры общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет.

Volkov Petr Vyacheslavovich is a post-graduate student, General and Theoretical Physics Department, Chelyabinsk State Pedagogical University.

Волков Петр Вячеславович – аспирант, кафедры общей и теоретической физики, Челябинский государственный педагогический университет.

e-mail: peter-007@mail.ru

ЯДЕРНАЯ МАГНИТНАЯ РЕЛАКСАЦИЯ И НЕАФФИННАЯ ДЕФОРМАЦИЯ В СШИТЫХ ЭЛАСТОМЕРАХ

В.М. Чернов, А.В. Бутаков

Проведен импульсный ЯМР-эксперимент и найдена зависимость второго момента M_2 остаточного диполь-дипольного взаимодействия от степени растяжения λ сшитого эластомера. Теоретические зависимости $M_2(\lambda)$, построенные на основе традиционных предположений о том, что функция распределения расстояний между химическими сшивками является гауссовой, а деформация – аффинной, не совпадают с экспериментальными. Учет неаффинности деформации образца, являющейся следствием распределения густоты химических сшивок, и замена гауссовского распределения цепей на ланжевеновское позволили добиться полного совпадения теоретических и экспериментальных зависимостей второго момента от степени растяжения.

Ключевые слова: ядерная магнитная релаксация, эластомер, одноосное растяжение, неаффинная деформация, распределение, сшивка.

Введение

Одними из наиболее информативных методов исследования крупномасштабных движений молекул и состояния сетки химических сшивок в сшитых эластомерах являются методы ядерной магнитной резонансной спектроскопии и релаксометрии. Среди них особый интерес представляют исследования в образцах, подвергнутых деформации растяжения [1–5]. Анализ результатов работ [1–3] по измерению времени поперечной релаксации и второго момента в сшитых эластомерах показал, что зависимости полученных параметров от степени растяжения оказываются слабыми и не согласуются с теоретическими [4–6], построенными на основе предположений о том, что функция распределения расстояний между химическими сшивками является гауссовой, полные контурные длины всех цепей сетки одинаковы и деформация является аффинной.

Целью данной работы является проведение нового эксперимента по снятию спада поперечной намагниченности и определению второго момента остаточного диполь-дипольного взаимодействия в зависимости от степени растяжения и объяснение полученных результатов на основе введения в рассмотрение ланжевеновской функции распределения вместо гауссовой и на учете неаффинности деформации образца.

Объекты и методы исследования

Объектами исследования служили 4 образца полиизопренового каучука СКИ-3, вулканизованного серой с концентрацией 1 мол. %. Один из них служил в качестве исходного, а 3 подвергались различной степени одноосного растяжения. Растянутые образцы готовились следующим образом. После соответствующего растяжения полосы исходной резины фиксировались зажимами и помещались внутрь полости, которая заполнялась эпоксидной смолой. После суточной выдержки и отверждения смолы из полученного бруска вырезалась центральная часть длиной ~20 мм, которой путем слесарной обработки придавалась форма цилиндра. Образующая цилиндра была параллельна оси растянутого образца, а его диаметр был несколько меньшим внутреннего диаметра пробирки спектрометра. При помещении полученной таким образом капсулы внутрь пробирки, а последней – в датчик спектрометра, ось растяжения образца оказывалась направленной поперек магнитного поля спектрометра.

Во всех исследуемых образцах с помощью импульсной последовательности Хана на резонансной частоте протонов 25 МГц были сняты спады поперечной намагниченности (СПН). Во избежание нарушения целостности эпоксидной оболочки капсулы эксперименты проводились только

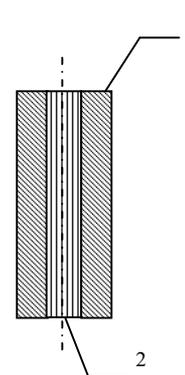


Рис. 1. Капсула с образцом: 1 – оболочка из затвердевшей эпоксидной смолы, 2 – растянутый вдоль оси симметрии образец каучука

при одной температуре 21,5 °С. Для нахождения времени затухания в области высокотемпературного плато $T_2^{пл}$ СПН исходного образца был представлен в виде

$$A_2(t) = \exp\left(-\frac{t}{T_2^6}\right) A_2^{пл}(t), \quad (1)$$

где T_2^6 – время, описывающее быстрые мелкомасштабные (сегментальные) движения, $A_2^{пл}(t)$ – спад поперечной намагниченности в области плато времени затухания поперечной намагниченности. После деления полученного при высоких температурах $A_2^{пл}(t)$ на $A_2(t)$ при комнатной температуре в исходном образце было найдено время T_2^6 . Оно оказалось равным 2,5 мс. Принимая согласно [2, 3], что T_2^6 при растяжении не изменяется, из полученных в эксперименте $A_2(t)$ по уменьшению в e раз были получены значения $T_2^{пл}$ в растянутых образцах. Для проверки правомерности такой методики расчета $T_2^{пл}$ один из образцов со степенью растяжения $\lambda = 2$ был нагрет до 80 °С. Оказалось, что измеренное в эксперименте время $T_2^{пл}$ (1,42 мс) практически совпадает с рассчитанным (1,45 мс). Второй момент остаточного диполь-дипольного взаимодействия рассчитывался как $M_2^{90^\circ} = \frac{2}{(T_2^{пл})^2}$ для гауссового СПН. Верхний индекс 90° – угол α между направлением вытяжки \vec{N} и полем \vec{H}_0 .

Результаты и обсуждение

Найденные значения $T_2^{пл}$ и $M_2^{90^\circ}$ для каждой степени растяжения приведены в табл. 1. В нашей работе проведен также анализ данных работы [3], в которой авторы осуществляли растяжение образца натурального каучука вдоль направления внешнего магнитного поля \vec{H}_0 . Второй момент $M_2^{0^\circ}$ был найден авторами из β -эхо-функции. Верхний индекс 0° – угол α между направлением вытяжки \vec{N} и полем \vec{H}_0 . В табл. 2 приведены данные работы [3].

Таблица 1
Значения $T_2^{пл}$, $M_2^{90^\circ}$ и M_{2i} в зависимости от растяжения λ в нашем эксперименте

λ	1	2,0	3,0	4
$T_2^{пл}$, мс	1,6	1,4	1,2	1,0
$M_2^{90^\circ} \times 10^{-6}$, с ⁻²	0,73	0,96	1,5	2,0
$M_{2i} \times 10^{-6}$, с ⁻²	0,73	1,15	1,86	2,45

Таблица 2
Значения $M_2^{0^\circ}$ и M_{2i} в зависимости от растяжения λ в эксперименте [3]

λ	1	1,05	1,18	1,40	1,53	1,75	2,14	2,48	3,03	3,33	3,96
$M_2^{0^\circ} \times 10^{-6}$, с ⁻²	1,2	1,3	1,4	1,5	1,6	2,1	2,7	3,5	4,5	6,8	8,3
$M_{2i} \times 10^{-6}$, с ⁻²	1,2	1,28	1,34	1,38	1,45	1,85	2,31	2,93	3,68	5,49	6,54

Значение второго момента определяется как степенью растяжения образца λ , так и углом α . Первое связано с увеличением длин векторов \vec{R} , соединяющих узлы сетки, второе – с ориентирующим фактором, обусловленным преимущественной ориентацией этих векторов вдоль направления вытяжки \vec{N} , происходящих при увеличении λ . Второй момент можно представить в форме [3]

$$M_2^\alpha = 5M_{2i} \left\langle \left(\frac{3 \cos^2 \theta - 1}{2} \right)^2 \right\rangle, \quad (2)$$

где θ – угол между векторами \vec{R} и \vec{N} , $\langle \dots \rangle$ – среднее по распределению θ , M_{2i} – изотропно-порошковый второй момент.

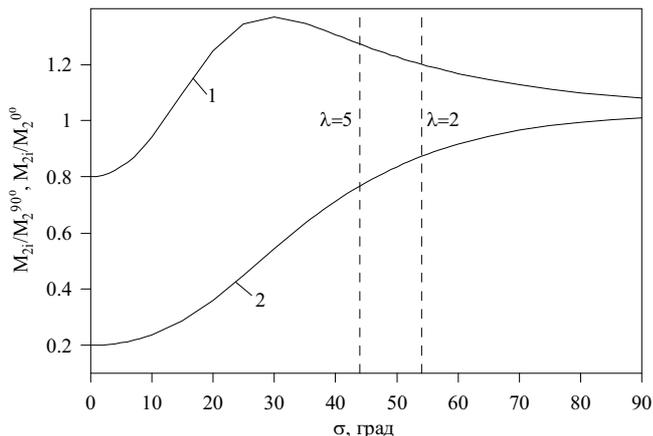


Рис. 2. Зависимости отношений $M_{2i}/M_2^{90^\circ}$ (1) и $M_{2i}/M_2^{0^\circ}$ (2) от дисперсии σ

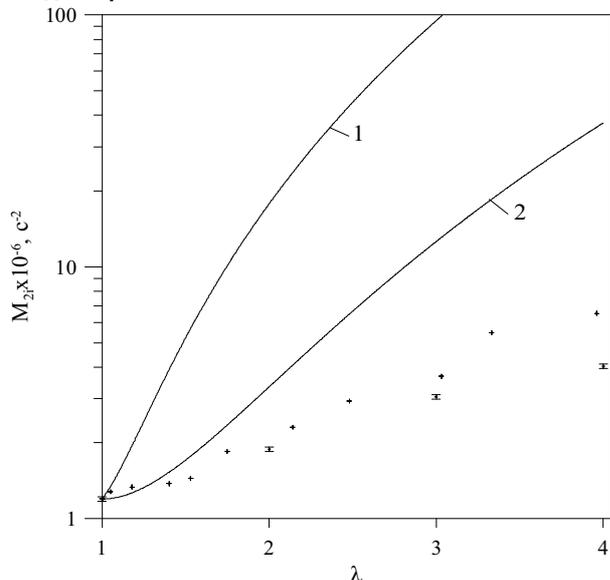


Рис. 3. Зависимость изотропно-порошкового второго момента M_{2i} от степени растяжения λ . Точки – экспериментальные значения, найденные в данной работе (●) и в [3] (+). Сплошные линии – теоретические кривые, полученные в предположении гауссовского (1) и ланжевеновского (2) распределений расстояний между узлами химических сшивок и аффинной деформации образца

На рис. 2 приведен результат расчета отношений вторых моментов $M_{2i}/M_2^{90^\circ}$ и $M_{2i}/M_2^{0^\circ}$, проведенного в предположении гауссового распределения углов θ с варьируемой дисперсией σ . В работе [3] экспериментальным путем получено, что растяжениям $\lambda = 5$ и $\lambda = 2$ соответствуют $\sigma = 44^\circ$ и $\sigma = 54^\circ$, обозначенные на рис. 1 вертикальными линиями. Пересечение этих линий с кривыми отношений вторых моментов дает по две реперные точки зависимостей $M_{2i}/M_2^{90^\circ}$ и $M_{2i}/M_2^{0^\circ}$ от λ . Третьей точкой этих зависимостей служила точка $M_{2i}/M_2^{90^\circ} = M_{2i}/M_2^{0^\circ} = 1$ при $\lambda = 1$. После проведения через эти точки плавных линий нами были найдены изотропно-порошковые вторые моменты M_{2i} для всех λ в обоих экспериментах (табл. 1 и 2). Как видно из табл. 1 и 2, изотропно-порошковые M_{2i} слабо отличаются от $M_2^{90^\circ}$ и $M_2^{0^\circ}$. Это свидетельствует о том, что ориентирующий фактор является слабым и распределение по углам θ близко к равновероятному.

На рис. 3 приведены экспериментальные и теоретическая [7]

$$M_{2i} = \frac{1}{3} \left(\lambda^4 - \frac{2}{3} \lambda + \frac{2}{3} \frac{1}{\lambda^2} \right) \quad (3)$$

зависимости $M_{2i}(\lambda)$. Последняя получена в предположениях гауссовского распределения расстояний между узлами химических сшивок и аффинной деформации образца. Для удобства сравнения полученных данных нами была проведена процедура масштабирования так, чтобы как экспериментальные точки, так и теоретическая кривая выходили

из одной и той же точки при $\lambda = 1$ эксперимента [3]. Как видно из этого рисунка, теоретическая зависимость $M_{2i}(\lambda)$ (кривая 1) значительно более сильная, чем экспериментальные.

Одной из причин несоответствия между теорией и экспериментом, как мы полагаем, является использование в классической теории упрощенной модели гауссовых цепей, которая применима только тогда, когда расстояние между узлами цепи много меньше контурной длины молекулы, что имеет место только при слабых растяжениях ($\lambda < 2$). В более общем случае, как показано Куном и Грюном [10], необходимо использовать ланжевеновские цепи, для которых второй момент остаточного диполь-дипольного взаимодействия в отсутствие растяжения в соответствии с [9] должен быть записан в виде

$$M_2 = M_2^{rl} \left(1 - \frac{3L(\beta)}{\beta} \right)^2 \quad (4)$$

В выражении (4)

$$L(\beta) = \text{cth } \beta - \frac{1}{\beta} = \frac{R}{nl}, \quad (5)$$

где L – функция Ланжевена, $\beta = \arg L\left(\frac{R}{nl}\right)$ – обратная функция Ланжевена, а M_2^{rl} – второй момент жесткой решетки, n – число сегментов Куна в цепи сетки, l – длина сегмента.

При деформации сетки химических швов вектор \vec{R} переходит в новый вектор \vec{R}' . При условии, что имеет место сохранение объема, \vec{R} и \vec{R}' связаны друг с другом следующим образом [7]:

$$R^{2'} = R^2 \left(\frac{1}{\lambda} + \cos^2 \theta \left(\lambda^2 - \frac{1}{\lambda} \right) \right), \quad (6a)$$

когда деформация растяжения происходит вдоль внешнего магнитного поля и

$$R^{2'} = R^2 \left(\frac{1}{\lambda} + \sin^2 \theta \left(\lambda^2 - \frac{1}{\lambda} \right) \right), \quad (6б)$$

если растяжение осуществляется поперек внешнего магнитного поля. Полагая, что распределение по θ является равновероятным, получаем средние значения $\langle \cos^2 \theta \rangle = \langle \sin^2 \theta \rangle = 1/3$. С учетом этого после подстановки (6a) и (6б) в (4) для M_{2i} имеем

$$M_{2i} = M_2^{rl} \left[1 - \frac{3L \left(\arg L \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \sqrt{\frac{1}{\lambda} + \frac{1}{3} \left(\lambda^2 - \frac{1}{\lambda} \right)} \right) \right)}{\arg L \left(\frac{1}{\sqrt{n}} \sqrt{\frac{1}{\lambda} + \frac{1}{3} \left(\lambda^2 - \frac{1}{\lambda} \right)} \right)} \right]^2. \quad (7)$$

На рис. 3 приведена функция (7) (кривая 2). Видно, что замена упрощенной модели гауссовских цепей на ланжевенские дает на порядок лучшее соответствие между теорией и экспериментом. Тем не менее, различие между теоретическими и экспериментальными зависимостями остается значительным.

Мы считаем, что основной причиной несогласия теории с экспериментом является распределение густоты химических швов по объему образца и, как следствие, неаффинность деформации образца при его растяжении. В процессе производства одни части образца сшиваются в большей степени, другие – в меньшей. Представим далее образец каучука как совокупность однородных образцов, отличающихся друг от друга степенью сшивания. Пусть плотность химических швов ν изменяется вдоль оси растяжения образца непрерывно от $\nu^{(1)}$ до $\nu^{(m)}$. Из найденной в работе [9] связи $\nu \sim \sqrt{M_2}$ следует, что в качестве функции плотности распределения следует выбрать функцию $p(\sqrt{M_2})$. Тогда после введения обозначения $\sqrt{M_2} = u$ результирующий СПН $A_2^\lambda(t)$ при растяжении образца в λ раз должен иметь вид

$$A_2^\lambda(t) = \int_{u^{(1)}}^{u^{(m)}} p(u) \exp \left(- \frac{t^2}{2 \frac{u^2 \lambda^{x(u)}(u)}{}} \right) du, \quad (8)$$

где $\lambda^{x(u)}(u)$ определяется из графика теоретической зависимости второго момента для ланжевенских цепей (рис. 3, кривая 2) как отношение второго момента при растяжении λ ко второму моменту без растяжения. Для каждой степени растяжения по уменьшению сигнала $A_2^\lambda(t)$ в e раз определялось время поперечной релаксации T_2^λ , а затем рассчитывался второй момент M_{2i}^λ .

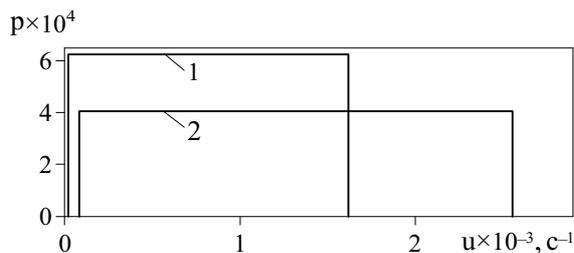


Рис. 4. Функция плотности вероятности $p(u)$ для зависимостей $M_{2i}(\lambda)$, полученных в данной работе (1) и в [3] (2)

Для нахождения закона изменения степеней растяжения $\lambda(u)$ вдоль оси деформации образца, мы исходили из того, что наша система находится в равновесии – сила, прикладываемая к любому элементу образца имеет одно и то же значение. Из связи силы с механическим напряжением H и закона сохранения объема образца получаем

$$\frac{d\left(\frac{H}{\lambda}\right)}{du} = 0. \quad (9)$$

С другой стороны, из теории упругости каучука [8] следует, что приложенное напряжение связано со степенью растяжения соотношением

$$H = G\left(\lambda^2 - \frac{1}{\lambda}\right), \quad (10)$$

где $G = \frac{\gamma pRT}{M_c}$, γ – числовой коэффициент, величина которого зависит от особенностей структуры сетки, R – газовая постоянная, T – температура, M_c – молекулярная масса части молекулы, лежащей между последовательно расположенными точками поперечных сшивок, ρ – плотность полимера. Используя полученную в работе [9] связь между M_2 и M_c

$$M_{2i} \sim \frac{1}{M_c^2}, \quad (11)$$

выражение (10) перепишется в виде

$$H \sim u\left(\lambda^2(u) - \frac{1}{\lambda(u)}\right). \quad (12)$$

После введения обозначения $\frac{u\left(\lambda^2(u) - \frac{1}{\lambda(u)}\right)}{\lambda(u)} = \xi$ система уравнений для нахождения $\lambda(u)$ примет вид

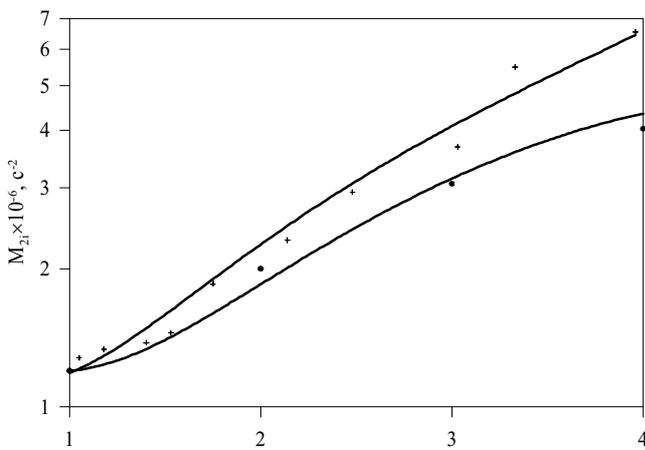


Рис. 5. Зависимость второго момента M_{2i} от степени растяжения λ образца. Точки – экспериментальные значения, полученные в данной работе (●) и взятые из работы [3] (+). Сплошные линии – теоретические кривые, полученные в предположении ланжевеновского распределения расстояний между узлами химических сшивок и учета неаффинности деформации образца

$$\begin{cases} \frac{d\xi}{du} = 0 \\ \lambda = \int_{u^{(1)}}^{u^{(m)}} p(u)\lambda(u) du \end{cases}. \quad (13)$$

При осуществлении подгонки теоретической зависимости $M_{2i}(\lambda)$ к экспериментальной было установлено, что подбор функции $p(u)$ – процедура неоднозначная. Необходимо учитывать форму СПН и подбирать физически реальные значения вторых моментов при растяжении. Наиболее простыми и, в то же время, удовлетворяющими этим требованиям являются прямоугольные распределения, изображенные на рис. 4. Найденные для них теоретические зависимости $M_{2i}(\lambda)$ представлены на рис. 5.

Основной результат данной работы – факт неаффинности деформации сшитого полимерного образца находится в явном противоречии с классической теорией упругости каучуков [8, 10]. Мы полагаем, что это противоречие разрешается тем, что выявленная нами неаффинность касается только микроуровня, определяемого средним расстоянием между сшивками. Таким образом, мы констатируем, что на микроуровне деформация образца является неаффинной, а на макроуровне – аффинной.

Выводы

Использование модели ланжевенских цепей вместо гауссовых дает на порядок лучшее соответствие между теоретическими и экспериментальными зависимостями $M_2(\lambda)$. В то же время различие между этими зависимостями остается весьма значительным.

Основной причиной несогласия теории с экспериментом является распределение густоты химических сшивок по объему образца и, как следствие, неаффинность деформации образца при его растяжении.

Учет неаффинности деформации, осуществленный подбором распределения густоты сшивок по объему образца позволил добиться полного совпадения теоретических и экспериментальных зависимостей второго момента остаточного диполь-дипольного взаимодействия от степени растяжения.

На микроуровне деформация образца является неаффинной, а на макроуровне – аффинной.

Литература

1. Федотов, В.Д. Влияние растяжения и набухания на затухание поперечной ядерной намагниченности в сшитых каучуках / В.Д. Федотов, В.М. Чернов // *Высокомолекулярные соединения*. – 1979. – Т. (Б)XXI, № 3. – С. 216–220.
2. Чернов, В.М. Ядерная магнитная релаксация и молекулярные движения в аморфных полимерах: дис. ... канд. физ.-мат. наук / В.М. Чернов. – Казань, 1980. – 240 с.
3. Callaghan, P.T. Molecular Ordering and the Direct Measurement of Weak Proton-Proton Dipolar Interactions in a Rubber Network / P.T. Callaghan, E.T. Samulski // *Macromolecules*. – 1997. – V. 30. – P. 113–122.
4. Contributions to the Total Orientation of Deformed Elastomers Arising from the Network Structure and Chain Interactions As Measured by NMR / M.E. Ries, M.G. Brereton, P.G. Klein *et al.* // *Macromolecules*. – 1999. – V. 32, № 15. – P. 4961–4968.
5. Klein, P.G. The dynamics and physical structure of polymers above the glass transition – transverse relaxation studies of linear chains, star polymers and networks / P.G. Klein, M.E. Ries // *Progr. in Magn. Res. Spectr.* – 2003. – V. 42. – P. 31–52.
6. Марченков, В.В. Теоретическое исследование влияния молекулярных движений на ЯМР-спектры аморфных полимеров // автореферат дис. ... канд. физ.-мат. наук./ В.В. Марченков. – М., 1987. – 23 с.
7. Warner, M. Nuclear Magnetic Resonance Line Shape from Strained Gaussian Networks / M. Warner, P.T. Callaghan, E.T. Samulski // *Macromolecules*. – 1997. – V. 30. – P. 4733–4736.
8. Трелоар, Л. Физика упругости каучука / Л. Трелоар. – М., 1953. – 240 с.
9. Влияние сетки химических сшивок на спин-спиновую релаксацию в сшитых набухших полимерных системах / Ю.Я. Готлиб, М.И. Лифшиц, В.А. Шевелев и др. // *Высокомолекулярные соединения*. – 1976. – Т. (А)XVIII, № 10. – С. 2299–2303.
10. Kuhn, W. Beziehungen zwischen elastischen Konstanten und Dehnungsdoppelbrechung hochelastischer Stoffe / W. Kuhn, F. Grun // *Kolloid-Zeitschrift*. – 1942. – V. 101. – P. 248–271.

Поступила в редакцию 16 мая 2010 г.

NUCLEAR MAGNETIC RELAXATION AND NONAFFINE DEFORMATION IN CROSS-LINKED ELASTOMERS

A pulsed NMR-experiment was carried out and the dependence of the second moment M_2 of the residual dipole-dipole interaction on the stretch ratio λ of cross-linked elastomer was established. The theoretical dependencies $M_2(\lambda)$ calculated on the basis of traditional approaches saying that function of interval distribution between chemical cross-links is Gaussian and the deformation is affine, do not agree with the experimental data. The account of the nonaffine deformation of the sample which is a consequence of the distribution of density of chemical cross-links, and replacement of distribution of the Gaussian chains by the Langevin ones allowed to achieve full coincidence of the theoretical and experimental dependences of the second moment on the stretch ratio.

Keywords: nuclear magnetic relaxation, elastomer, uniaxial extension, nonaffine deformation, distribution, cross-link.

Chernov Vladimir Mikhailovich is Cand.Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Radiophysics and Electronics Department, Chelyabinsk State University

Чернов Владимир Михайлович – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра радиофизики и электроники, Челябинский государственный университет.

e-mail: chernov@csu.ru

Butakov Anatoly Vladimirovich is a post-graduate student, Radiophysics and Electronics Department, Chelyabinsk State University

Бутаков Анатолий Владимирович – аспирант, кафедра радиофизики и электроники, Челябинский государственный университет.

e-mail: anamol912@rambler.ru

КЛАСТЕРНЫЙ АНАЛИЗ ФЛУКТУАЦИЙ ПРОВОДИМОСТИ ТОНКИХ ПЛАТИНОВЫХ ПЛЁНОК

А.А. Шульгинов

Предложено два метода кластеризации параметров флуктуаций проводимости платиновых плёнок. Первый предназначен для разделения видов шумов (белый шум, фликкер-шум и нестационарный процесс). Второй метод позволяет выделить резонансные частоты в спектре флуктуаций, присущие только этим образцам.

Ключевые слова: кластерный анализ, металлические плёнки, проводимость.

Введение

Кластерный анализ – задача разбиения заданной выборки объектов (ситуаций) на подмножества, называемые кластерами, так, чтобы каждый кластер состоял из схожих объектов, а объекты разных кластеров существенно отличались [1]. Кластерный анализ – это многомерная статистическая процедура, выполняющая сбор данных, содержащих информацию о выборке объектов, и затем упорядочивающая объекты в сравнительно однородные группы (кластеры). Кластер – группа элементов, характеризуемых общим свойством, главная цель кластерного анализа – нахождение групп схожих объектов в выборке.

Согласно представлениям фликкер-шумовой спектроскопии [2], реальный случайный процесс является суммой процессов, различных по своей природе. Можно выделить «ламинарную» фазу, когда процесс стационарный и не содержит нерегулярностей (всплесков и скачков). Иногда «ламинарная» фаза перемежается с «турбулентной», которая характеризуется существенной нестационарностью. Кроме того, в любом случайном процессе могут присутствовать выбросы и скачки. Применение кластерного анализа позволяет разделить эти процессы. Это необходимо для того, чтобы проанализировать их причину и описать закономерности появления нерегулярностей.

Описание эксперимента

Цель эксперимента состояла в том, чтобы определить характеристики флуктуаций проводимости терморезисторов 701-102ВАВ-В00, представляющих собой тонкие платиновые плёнки в форме меандра, нанесённые на подложки. Для сравнения одновременно регистрировались флуктуации проводимости магнитного детектора НМС1021Z, представляющего собой пермаллоевую плёнку в форме меандра, а также прецизионные непроволочные резисторы С2-14.

Исследуемые сенсоры были включены в мостовую схему, на которую подавалось постоянное напряжение U_m . Всего было собрано 6 мостов: 4 моста с платиновыми резисторами (Pt(1)–Pt(4)) по 2 в каждом, которые были соединены в полумосты, 1 мост – с магнитным детектором, 2 пермаллоевых резистора которого были также соединены в полумост, 1 мост с прецизионными резисторами для регистрации «фона» флуктуаций. Другие сопротивления всех этих мостов были такими же прецизионными резисторами номиналом 1 кОм. Магнитный детектор и платиновые терморезисторы имели номинал также около 1 кОм. Напряжение в диагонали каждого моста усиливалось с помощью операционного усилителя (ОУ) AD623. Как мосты, так и ОУ запитывались от одного аккумулятора с напряжением $U_p = 12$ В. Выходные напряжения из усилителей подавались на входы 16-канальной платы сбора данных L-1450 для одновременной регистрации флуктуаций. Частота регистрации составляла $f_{\max} = 13,9$ Гц для каждого из шести каналов. Длительность регистрации составила 17 дней.

Обработка результатов

Все данные были разбиты на записи с половинным перекрытием по времени. Длительность одной записи $T = 589$ с. Количество записей N составило 4080.

Существует бесконечное множество видов кластеризаций. Наиболее удобной является кластеризация в двумерном пространстве выбранных параметров.

Первый способ кластеризации.

1. Обезразмеривание: $\bar{U}(t) = \frac{U(t)}{U_m}$, где U_m – напряжение моста.
2. Вычитание линейного сплайна.
3. Вычитание выбросов.
4. Быстрое Фурье-преобразование. Получаем $\bar{U}^*(f)$.
5. Определение спектра мощности флуктуаций $S(f) = \frac{|\bar{U}^*(f)|^2}{T}$.
6. Определение параметра γ методом наименьших квадратов путём приближения степенной функцией $S(f) = A/f^\gamma$ без учёта низших частот.
7. Другой безразмерный параметр P характеризует мощность флуктуаций в выбранном диапазоне частот: $P = \frac{1}{T} \int_0^T |U(t)|^2 dt$.

Для кластеризации были выбраны 2 безразмерных параметра: P и γ . Параметр P является характеристикой энергии флуктуаций проводимости, а γ является их спектральной характеристикой. Для белого шума $\gamma = 0$, для стационарного фликкер-шума $\gamma = 0,8-1,2$, а для нестационарных процессов $\gamma > 1,5$ [3]. Фликкер-шум обусловлен преимущественно внутренними процессами, происходящими в металлической плёнке, например, флуктуациями подвижности носителей заряда. Нестационарные процессы обусловлены, в основном, внешними воздействиями, например, флуктуациями электромагнитного поля, тепловыми потоками или воздействием скрытой материи. Если изобразить каждое измерение точкой на графике $P-\gamma$, то они группируются вокруг определённых центров. Информацию о флуктуациях проводимости образцов несёт количество кластеров, их положение и форма. В звёздной астрономии аналогом является диаграмма «спектр–светимость». Звёзды на этой диаграмме располагаются не случайно, а образуют хорошо различимые кластеры.

Результаты обработки флуктуаций проводимости для шести образцов представлены на рис. 1. Заметно существенное сходство форм и положений кластеров для всех образцов с платиновыми терморезисторами. Большая часть точек попадает в кластер, который можно охарактеризовать как стационарный фликкер-шум. Замечен также кластер белого шума у всех четырёх образцов Pt(1)–Pt(4). Нестационарный шум не образует отдельного кластера, а является продолжением основного фликкер-шумового кластера. Диаграммы двух других образцов существенно отличаются от первых четырёх. Образец с прецизионными резисторами был использован, чтобы оценить шумы от них самих и шумы усилительного тракта. Эти флуктуации образуют компактный кластер на диаграмме $P-\gamma$. Подобный кластер можно заметить на всех остальных диаграммах, особенно на диаграмме Pt(3), Pt(4) и у магнитного детектора.

Таким образом, этот метод кластеризации позволяет отделить различные виды шумов друг от друга, чтобы исследовать их закономерность. Кроме того, наличие существенного сходства кластеров, полученных от аналогичных источников, и значительные отличия их от других позволяют создать алгоритм идентификации образцов по их шумовым характеристикам.

Предложим другой способ обработки того же статистического материала.

1. Определение спектра мощности флуктуаций $S(f)$ (повторение пп. 1–5 из первого способа).
2. Вычитание линейного сплайна $S^0(f) = S(f) - (k \cdot f + a)$, полученного методом наименьших квадратов.
3. Определение максимума функции $S_m^0 = \max(S^0(f))$ по всему исследуемому частотному диапазону, исключая низкие частоты и соответствующую ему частоту f_m .
4. Нормировка $S_{\max} = S_m^0 / \sigma_S$, где σ_S – стандартное отклонение функции $S^0(f)$.
5. Построение графика зависимости $S_{\max}(f_m)$ (рис. 2, 3).

Этот способ позволяет выявить резонансные частоты в спектре флуктуаций. Для сравнения построим усреднённые спектрограммы флуктуаций $\langle S \rangle$ как функции частоты f . На диаграммах слева явно выделяются резонансные частоты, а на графиках справа они видны гораздо слабее или совсем не видны, например у образца Pt(3). Резонансные частоты флуктуаций проводимости, вероятно, связаны с внешними воздействиями. У образцов с платиновыми терморезисторами они составляют: 2,05, **2,13**, 2,21, 3,08, 3,36, **4,24**, 5,28, 5,64, 6,31, 6,38, 6,46 Гц. У образца с магнитным датчиком: 1,67, 1,82, **2,13**, 2,33, 2,79, 3,87, 4,00, **4,26**, 4,67, 5,00, 5,35, 6,00, 6,67 Гц. Совпадающие или близкие частоты выделены полужирным шрифтом. У образца с прецизионными резисторами резонансных частот не обнаружено.

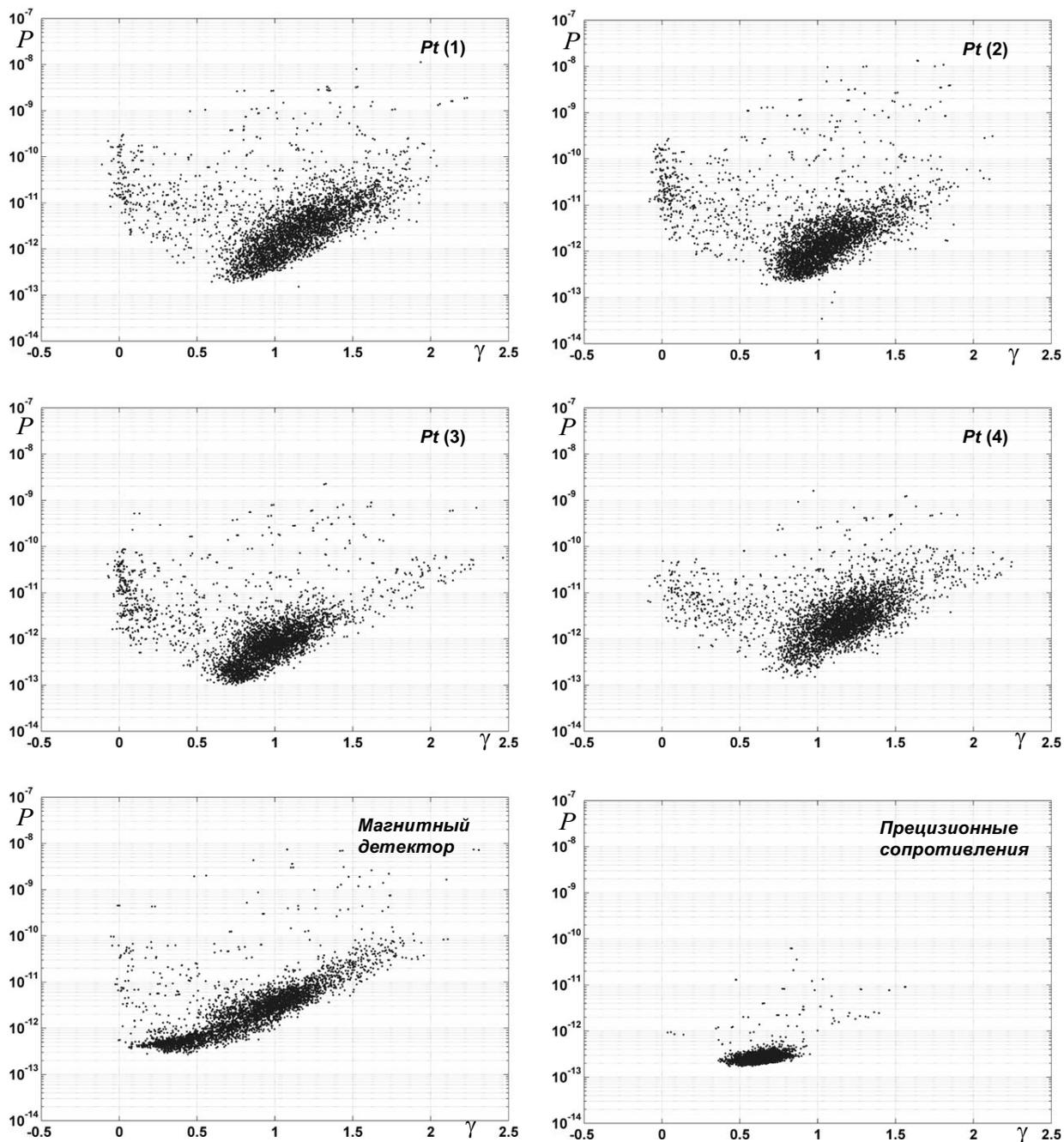


Рис. 1. Кластеры флуктуаций проводимости образцов платины (Pt(1)–Pt(4)), а также магнитного детектора и прецизионных сопротивлений в координатах P – γ

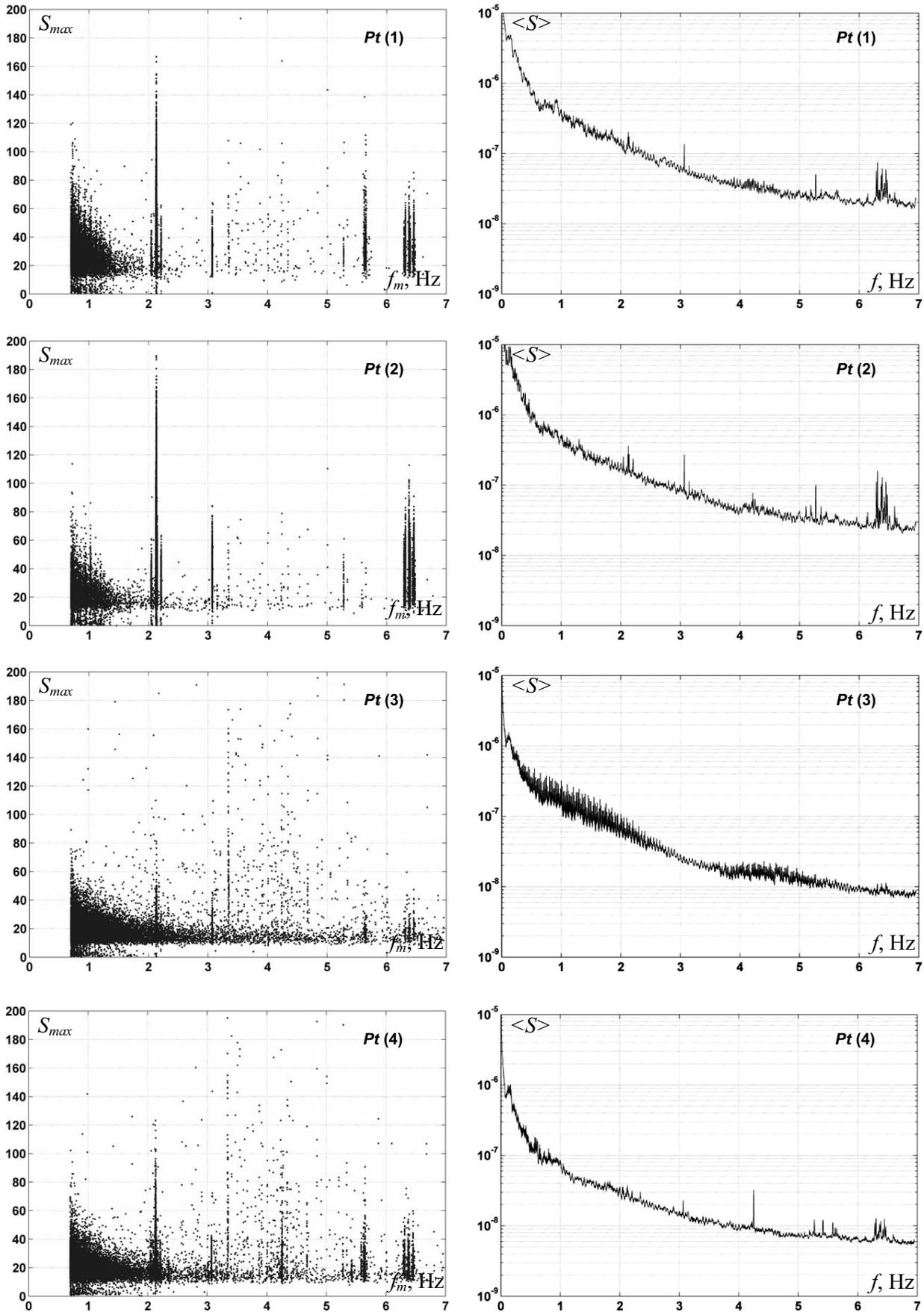


Рис. 2. Кластеры флуктуаций проводимости образцов платины (Pt(1)–Pt(4)) в координатах S_{max} – f_m (слева) и усреднённые спектрограммы (справа)

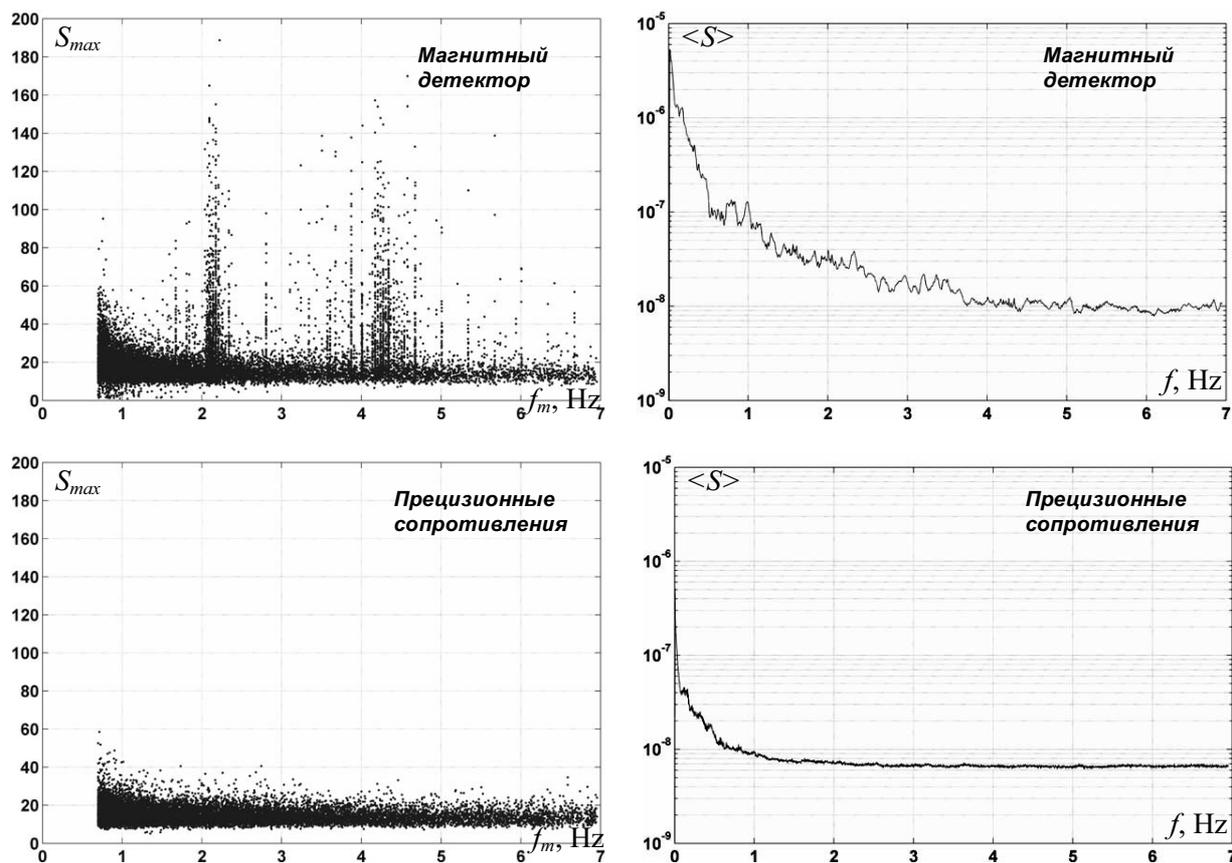


Рис. 3. Кластеры флуктуаций проводимости магнитного детектора и прецизионных сопротивлений в координатах $S_{max}-f_m$ (слева) и усреднённые спектрограммы (справа)

Таким образом, этот метод кластеризации позволяет выявить внешние периодические воздействия на детекторы и особенности их отклика на них.

Литература

1. Штовба, С.Д. Проектирование нечётких систем средствами MATLAB / С.Д. Штовба. – М.: Горячая линия – Телеком, 2007. – 288 с.
2. Тимашев, С.Ф. Фликкер-шумовая спектроскопия: информация в хаотических сигналах / С.Ф. Тимашев // М.: Физматлит, 2007. – 248 с.
3. Жигальский, Г.П. Неравновесный $1/f^\alpha$ -шум в проводящих плёнках и контактах / Г.П. Жигальский // УФН. – 2003. – Т. 173, № 5. – С. 465–490.

Поступила в редакцию 12 апреля 2010 г.

CLUSTER ANALYSIS OF FLUCTUATION CONDUCTIVITY OF THE THIN PLATINUM FILMS

Two methods of clustering of fluctuation conductivity parameters of platinum metal films are suggested. The first method is used for distinguishing the noise types (white noise, flicker-noise, nonstationary process). The second method allows to distinguish the resonance frequencies in the fluctuation spectrum which are peculiar for these samples only.

Keywords: clustering analysis, metal films, conductivity.

Shulginov Alexandr Anatolievich is Cand.Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, General and Experimental Physics Department, South Ural State University.

Шульгинов Александр Анатольевич – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра общей и экспериментальной физики, Южно-Уральский государственный университет.
e-mail: saa@susu.ac.ru

ТРЕБОВАНИЯ К ПУБЛИКАЦИИ СТАТЬИ

1. В редакцию предоставляется электронная (документ MS Word) версия работы, экспертное заключение о возможности опубликования работы в открытой печати, сведения об авторах (Ф.И.О., место работы, звание и должность для всех авторов работы), контактная информация ответственного за подготовку рукописи.

2. Структура статьи: УДК, название (не более 12–15 слов), список авторов, аннотация (не более 500 знаков), список ключевых слов, текст работы, литература (в порядке цитирования, ГОСТ 7.1–2003). После текста работы следует название, аннотация, список ключевых слов и сведения об авторах на английском языке.

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 пт, 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 желательно предоставить рисунки и в виде отдельных файлов.

6. Адрес редакции журнала «Вестник ЮУрГУ» серии «Математика. Механика. Физика»: Россия 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76, Южно-Уральский государственный университет, физический факультет, кафедра ОиТФ, ответственному редактору профессору 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 ссылкой: «Научные исследования», «Издательская деятельность», «Вестник ЮУрГУ», «Серии».

9. Подписной индекс журнала «Вестник ЮУрГУ», серия «Математика. Механика. Физика»: 29211, каталог «Пресса России». Интернет-каталог агентства «Книга-Сервис», подписной индекс: E29211.

ВЕСТНИК ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА

№ 30 (206) 2010

Серия
«МАТЕМАТИКА. МЕХАНИКА. ФИЗИКА»
Выпуск 3

Редактор Н.М. Лезина

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 06.10.2010. Формат 60×84 1/8. Печать трафаретная.
Усл. печ. л. 13,72. Уч.-изд. л. 11,90. Тираж 500 экз. Заказ 399/689.

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ. 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.