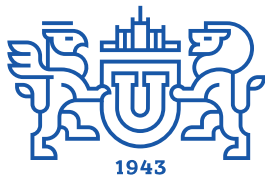


ВЕСТНИК



**ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА**

**2017
Т. 9, № 4**

ISSN 2075-809X (Print)
ISSN 2409-6547 (Online)

СЕРИЯ

**«МАТЕМАТИКА.
МЕХАНИКА.
ФИЗИКА»**

Решением ВАК России включен в Перечень рецензируемых научных изданий

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

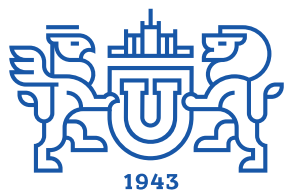
Основной целью серии «Математика. Механика. Физика» является публикация и распространение оригинальных результатов научных исследований в области математики, механики и физики, а также их приложений в естественных, технических и экономических науках.

Редакционная коллегия

д.ф.-м.н., профессор **Загребина С.А.** (гл. редактор)
к.ф.-м.н., доцент **Голубев Е.В.** (отв. секретарь)
д.ф.-м.н., профессор **Бескачко В.П.** (ЮУрГУ)
к.ф.-м.н., профессор **Заляпин В.И.** (ЮУрГУ)
д.ф.-м.н., профессор **Ковалев Ю.М.** (ЮУрГУ)

Редакционный совет

д.т.н., профессор **Богомолов А.В.** (Государственный научный центр Российской Федерации – Федеральный медицинский биофизический центр имени А.И. Бурназяна, г. Москва)
д.ф.-м.н. **Бржезинская М.М.** (Берлинский центр материалов и энергии им. Гельмгольца, г. Берлин, Германия)
профессор **Гвидетти Д.** (Болонский университет, г. Болонья, Италия)
д.ф.-м.н., профессор **Жуковский В.И.** (Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва)
д.ф.-м.н., профессор **Короткий А.И.** (Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН, г. Екатеринбург)
д.ф.-м.н., член-корреспондент РАН, профессор Физики и Оптики **Зельдович Б.Я.** (КРЕОЛ, Университет Центральной Флориды, г. Орландо, США)
Ph. D., профессор **Ким Джейван** (Kim Jaewan, Корейский институт передовых исследований KIAS, г. Сеул, Южная Корея)
Ph. D., профессор **Ким Кишик** (Kim Kisik, INHA-Университет, г. Инчон, Южная Корея)
д.ф.-м.н., профессор **Кундикова Н.Д.** (Институт электрофизики УрО РАН, г. Екатеринбург)
д.ф.-м.н., профессор **Меньших В.В.** (Воронежский институт МВД Российской Федерации, г. Воронеж)
д.ф.-м.н., профессор **Пинчук С.И.** (Университет штата Индиана, г. Блумингтон, США)
Ph. D., ассистент-профессор **Пузырев Е.С.** (Университет Вандербильта, г. Нэшвилл, США)
д.т.н., профессор **Равшанов Н.К.** (Ташкентский университет информационных технологий, г. Ташкент, Узбекистан)
д.т.н., профессор **Уткин Л.В.** (Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, г. Санкт-Петербург)
Prof. dr. ir. **Ферпуст И.** (Католический университет, г. Лёвен, Бельгия)
д.ф.-м.н., Ph. D., профессор **Штраус В.А.** (Университет Симона Боливара, г. Каракас, Венесуэла)



BULLETIN

OF THE SOUTH URAL
STATE UNIVERSITY

2017
Vol. 9, no. 4

SERIES

“MATHEMATICS.
MECHANICS. PHYSICS”

ISSN 2075-809X (Print)
ISSN 2409-6547 (Online)

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

South Ural State University

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

Editorial Board

S.A. Zagrebina, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E.V. Golubev, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
V.P. Beskachko, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
V.I. Zalyapin, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
Yu.M. Kovalev, South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

Editorial Council

A.V. Bogomolov, State Scientific Center of the Russian Federation – A.I. Burnazyan Federal Medical Biophysical Center, the Russian Federal Medical-Biological Agency, Moscow, Russian Federation
M.M. Brzhezinskaya, Helmholtz-Zentrum Berlin for Materials and Energy, Berlin, Germany
D. Guidetti, University of Bologna, Bologna, Italy
V.I. Zhukovsky, Moscow State University, Moscow, Russian Federation
A.I. Korotkii, Institute of Mathematics and Mechanics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation
B.Ya. Zeldovich, CREOL, University of Central Florida, Orlando, United States of America
Jaewan Kim, Korea Institute for Advanced Study KIAS, Seoul, South Korea
Kisik Kim, INHA-University, Incheon, South Korea
N.D. Kundikova, Institute of Electrophysics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Ekaterinburg, Russian Federation
V.V. Menshikh, Voronezh Institute of Russian Ministry of Internal Affairs, Voronezh, Russian Federation
S.I. Pinchuk, Indiana University, Bloomington, United States of America
Y.S. Puzyrev, Vanderbilt University, Nashville, United States of America
N.K. Ravshanov, Tashkent University of Information Technologies, Tashkent, Uzbekistan
L.V. Utkin, Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg
I. Verpoest, Catholic University, Leuven, Belgium
V.A. Strauss, University of Simon Bolivar, Caracas, Venezuela

СОДЕРЖАНИЕ

Математика

GARIN E.V., MESHCHERYAKOV R.V. Method for Determination of the Social Graph Orientation by the Analysis of the Vertices Valence in the Connectivity Component.....	5
КОМИССАРОВА Д.А., КИПНИС М.М. Сравнение нескольких признаков устойчивости линейных разностных уравнений.....	13
ПЯТКОВ С.Г., РОТКО В.В. Об определении функции источника в квазилинейных параболических задачах с точечными условиями переопределения.....	19
SOLOVYOVA N.N., ZAGREBINA S.A., SVIRIDYUK G.A. Sobolev Type Mathematical Models with Relatively Positive Operators in the Sequence Spaces.....	27
УШАКОВ А.Л. Быстрое решение модельной задачи для уравнения Пуассона.....	36

Механика

КОВАЛЕВ Ю.М., ШЕРШНЕВА О.А. Моделирование тепловой составляющей уравнений состояния молекулярных кристаллов	43
КУРОПАТЕНКО В.Ф., МАГАЗОВ Ф.Г., ШЕСТАКОВСКАЯ Е.С. Аналитическое решение задачи о сходящейся ударной волне в газе в одномерном случае	52

Физика

ДРЯЗГОВ М.А., СВИРИДОВА И.В., ИСАКОВ Д.С., МИКЛЯЕВ Ю.В. Метод получения оптических суперосцилляций на основе трехволновой интерференции.....	59
МИРЗАЕВ Д.А., МИРЗОЕВ А.А., БУЛДАШЕВ И.В., ОКИШЕВ К.Ю. Химические потенциалы тетрагонального феррита и его равновесие с γ -фазой в сталях	66
СВИРИДОВА И.В., ДРЯЗГОВ М.А., КОРЕНЧЕНКО А.Е., БИБИКОВА Э.А. Численное исследование продольной компоненты электрического поля в электромагнитной волне.....	76
От редакционной коллегии	83

CONTENTS

Mathematics

GARIN E.V., MESHCHERYAKOV R.V. Method for Determination of the Social Graph Orientation by the Analysis of the Vertices Valence in the Connectivity Component.....	5
KOMISSAROVA D.A., KIPNIS M.M. Comparison of Several Stability Conditions for Linear Difference Equations	13
PYATKOV S.G., ROTKO V.V. On the Source Function Recovering in Quazilinear Parabolic Problems with Pointwise Overdetermination Conditions.....	19
SOLOVYOVA N.N., ZAGREBINA S.A., SVIRIDYUK G.A. Sobolev Type Mathematical Models with Relatively Positive Operators in the Sequence Spaces.....	27
USHAKOV A.L. Fast Solution of the Model Problem for Poisson's Equation.....	36

Mechanics

KOVALEV Yu.M., SHERSHNEVA O.A. Simulation of the Thermal Constituent of Molecular Crystals State Equations	43
KUROPATENKO V.F., MAGAZOV F.G., SHESTAKOVSKAYA E.S. Analytical Solution of the Problem of a Convergent Shock in Gas for One-Dimensional Case	52

Physics

DRYAZGOV M.A., SVIRIDOVA I.V., ISAKOV D.S., MIKLYAEV Yu.V. A New Method of Obtaining Optical Super-Oscillations based on Threewave Interference	59
MIRZAYEV D.A., MIRZOEV A.A., BULDASHEV I.V., OKISHEV K.Yu. Chemical Potentials of Tetragonal Ferrite and its Equilibrium with γ -Phase in Steels	66
SVIRIDOVA I.V., DRYAZGOV M.A., KORENCHENKO A.E., BIBIKOVA E.A. Numerical Analysis of the Longitudinal Component of Electric Field in Electromagnetic Wave.....	76
From the Editorial Board.....	83

METHOD FOR DETERMINATION OF THE SOCIAL GRAPH ORIENTATION BY THE ANALYSIS OF THE VERTICES VALENCE IN THE CONNECTIVITY COMPONENT

E.V. Garin, R.V. Meshcheryakov

Tomsk University of Control Systems and Radioelectronics, Tomsk, Russian Federation

E-mail: mrv@tusur.ru

The work is the continuation of the authors' work on the simulation of the structure of the society by the method of random graphs generation. In their previous works, the authors experimentally proved that the social graph has a strict orientation of the information direction propagation from the shares of the graph with high bonds density to the graph parts having a lower bond density. The authors proposed a method for determining the orientation of the social graph by investigating the ratio of the number of outgoing links to the incoming ones. This method found its application in the analysis of postal mailing, but it turned out to be practically inapplicable in the analysis of social networks, since the counting of incoming and outgoing communications required the compilation of the announced social graphs which was a time-consuming and computational resources task that does not have a solution for polynomial time at present.

Since the issue of the social networks analysis is not only of a strictly scientific, but also of a practical interest, the authors developed and tested a technique for determining the orientation of social graphs by the method of analyzing the numerical characteristics of a graph. The new method does not require a detailed analysis of the correspondence of users of social networks, but operates with open user information that is a list of friends (Friend List). The ultimate goal of this work is to develop simple and effective methods for analyzing social networks to identify "opinion leaders", ways of disseminating information, including propagandizing deviant and dependent forms of behavior, identifying anti-systems and separate closed network communities, and general monitoring of the state of social systems.

Keywords: social graph; random graphs; numerical characteristics of graphs; social graph orientation.

Introduction

The present work is devoted to the social graphs methods and researches. Two interrelated areas: the theory of generating of random graphs [1–7] and practical methodologies for studying of social and technical networks intersect in this field [8], remote diagnostics of a person's state using methods of mathematical modeling [9]. Both of these areas complement each other, and they are used for network monitoring: identifying channels of distribution of narcotic and psychotropic substances, the spread of radical literature and ideology, determining critical situations, to find out "opinion leaders" influencing on the nearest social community and forming the public opinion. Methods of identifying the orientation of the social graph that is identifying the direction of information propagation in social networks from the "opinion leaders" to the audience of readers presented in this paper.

1. An epidemic as a model of information dissemination in a network

In 2010 Grant Schoenbeck showed that if the epidemic distributes across the network of a random Watts–Strogatz graph [10] we will get a network that satisfies a power law, fig. 1.

The original Watts–Strogatz model did not satisfy the power law, because initially it was developed in accordance with the conditions of having a small diameter in the social graph. As well the Watts–Strogatz model imitated the presence of "linking rings" in the Internet web rather well. Linking rings represent definite motives of the social graph, namely the looping banner links of the advertising sites

with each other in order to increase the rate of citation artificially by indexing cloud search systems. Despite the artificial formation of these motives of the social graph, actually they reflect the presence observed in the closed ways of disseminating information.

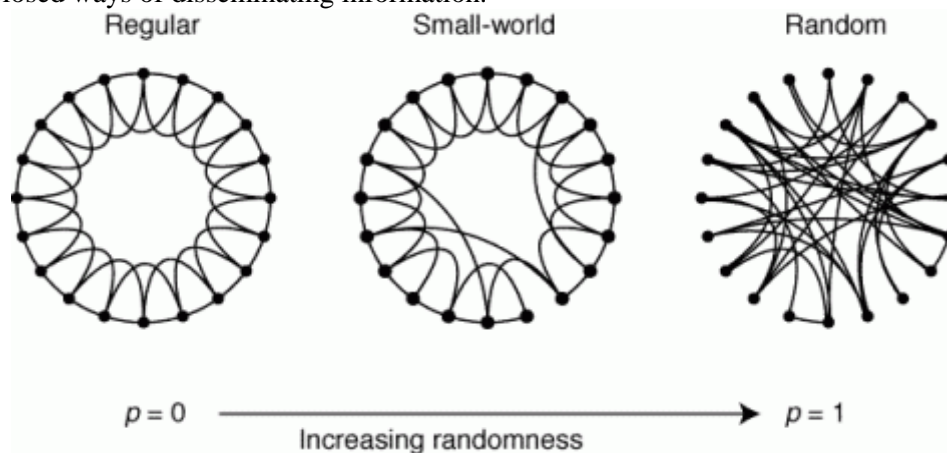


Fig. 1. Watts–Strogatz model of a random graph

In a series of studies, the authors showed that in addition to the closed nature of information dissemination in social graph, there exists a strict orientation of information dissemination [11, 12]. In this case, the authors developed a method of detecting the social graph orientation by the percolation coefficient analysis, where the percolation coefficient is the ratio of outbound links to inbound links. The percolation coefficient ratio refers increasingly to the entire society as a whole, or to certain groups of the society, such as, for example, the audience of a particular TV, radio, or the Internet media. It is hard to determine the percolation coefficient for a single person, moreover, all studies of the information dissemination in the society were aimed constantly at the studying of the group coefficient of percolation. This method is applicable to the analysis of the e-mail distribution when we know who sends the letter and from whom the letter is sent. Such method was not practically applicable in social network analysis, because it requires the individual review pages for each user of the social graph investigated to identify correlations of received and sent messages. It requires a more simple method of identifying the graph orientation by the available open data in the friend lists of users for the analysis of social networks.

2. A method of determining the orientation of the graph by the valence of the vertices (“a method to identify opinion leaders”)

To determine the distribution properties of the information in the society the authors conducted several experiments in social networks LinkedIn and Facebook. The oriented graph of information dissemination was constructed based on the results of the experiments. Initially, knowing the information about orientation of a graph, it was necessary to determine what easy calculation numerical characteristic of graphs correspond to their orientation.

The most obvious authors’ initial assumption was the conformity of the orientation distribution of the graph vertices according to the number of friends in friend lists (fig. 2).

The compliance verification of previously discovered graph orientation and the distribution according to the number of friends in friend lists shows serious discrepancies (right up to the fact, that the vertices on which closed oriented graph gets to the top of the distribution, because they have 5 000 friends). Besides, it is clear from figure 2 that almost 30 people out of 107 have a maximum value for the number of friends ($\approx 5\,000$), so it becomes impossible to identify the parameter values friend list of “opinion leaders” because there are too many potential candidates (28 %).

This distribution (fig. 2) has a strong divergence with a power distribution of vertices in the social graph (Pareto Rule). This difference has a trivial explanation as the social network Facebook is built with an additional constraint that does not exist in the real society, that is the restriction of the vertices valences of the graph to 5,000 links. The discrepancy in the orientation of the graph to the total number of friends has one explanation: a large number of friends is not an indicator of the source of information in the society, as all 5,000 human connections can be inbound.

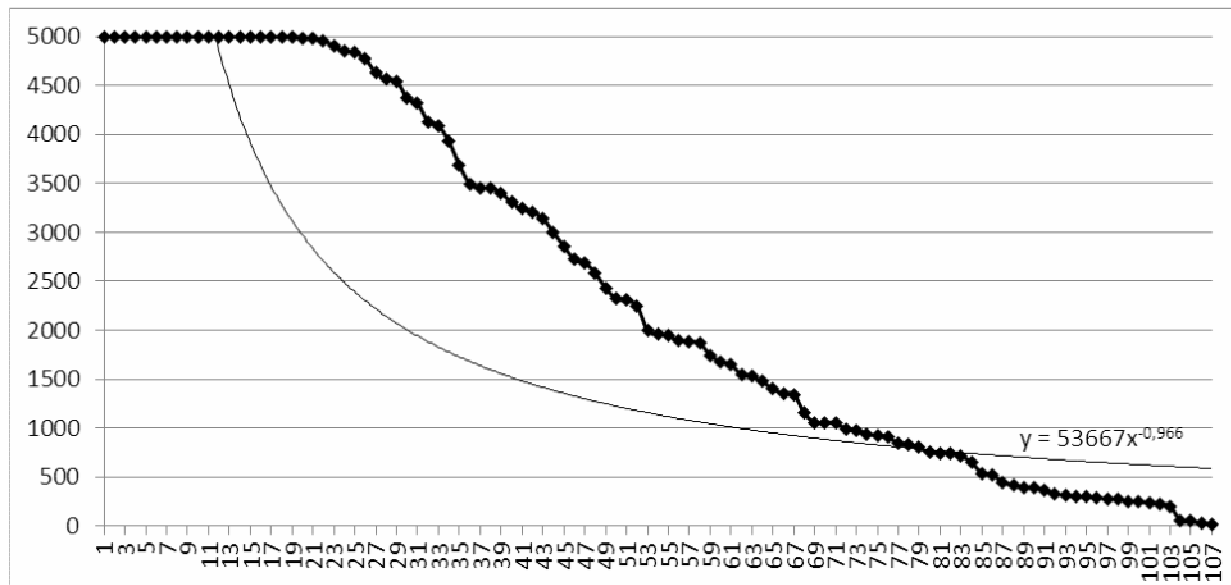


Fig. 2. The social graph distribution according to the number of friends in friend lists

The authors of this research had to complicate the task, and to investigate the valence of each vertex for a bounded social graph including only the participants of the experiment. This was done by comparative analysis of all the friend-lists of participants in the experiment. After that, all the vertices were located in the descending order valence, and communication between vertices were visualized, – fig. 3:

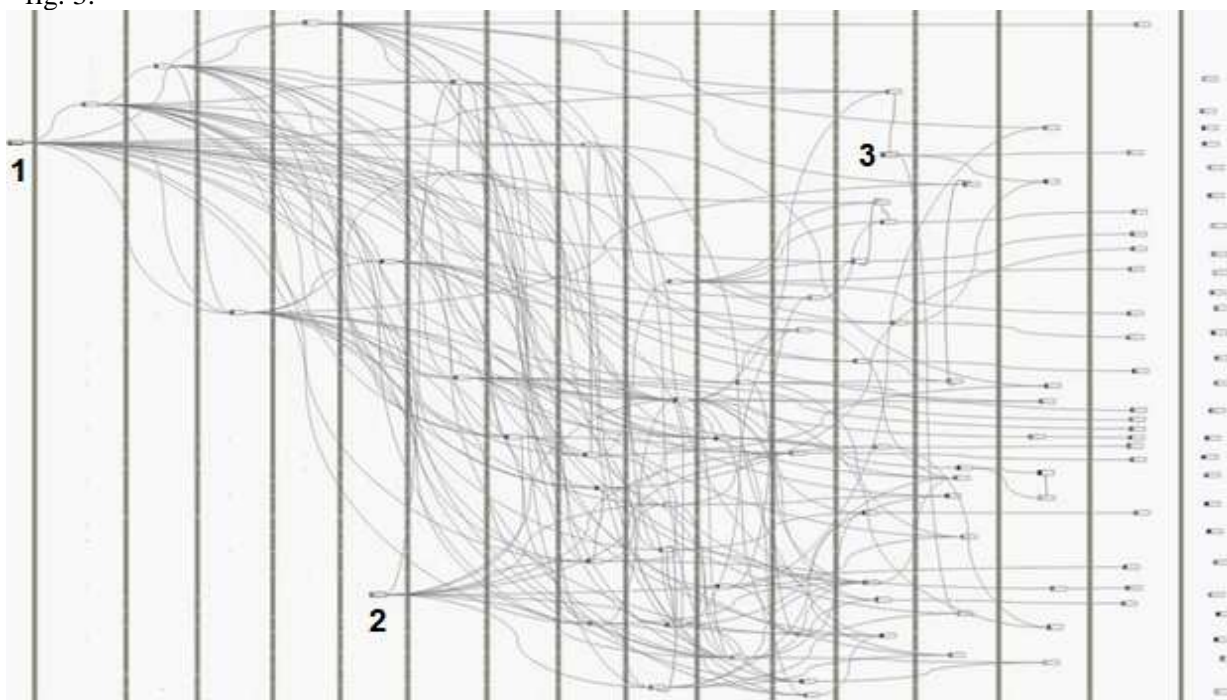


Fig. 3. The social graph with descending vertices valences orientation

The comparison of the resulting graph with the previously constructed oriented graph showed almost a complete matching, that is up to 88 % and it allowed us to draw some conclusions:

1. Social graph orientation actually coincides with the valences distribution of graph vertices.
2. Graph arrangement according to the vertices valences (fig. 3.) is more informative than the “simple” arrangement by the number of friends in friend-list, or even by the number of common friends. This arrangement allows to identify at once the clear “opinion leaders”, who are the primary sources of information dissemination. “Opinion leaders” are labeled as vertices 1, 2, 3 in fig. 3. These vertices differ

from the others in the graph by a complete lack of relations with vertices having more than their valence. At the same time all the three vertices have different indices of valence. This fact agrees well with the field observations: there exist the “leaders of opinions” not only in large, but even in small groups.

3. the vertices distribution in the graph by valence (degree of vertex) correlates with the clustering coefficient of this vertex, that is the ratio of closed triplets in the investigated graph to which this vertex bounds, to the open triplets – fig. 4:

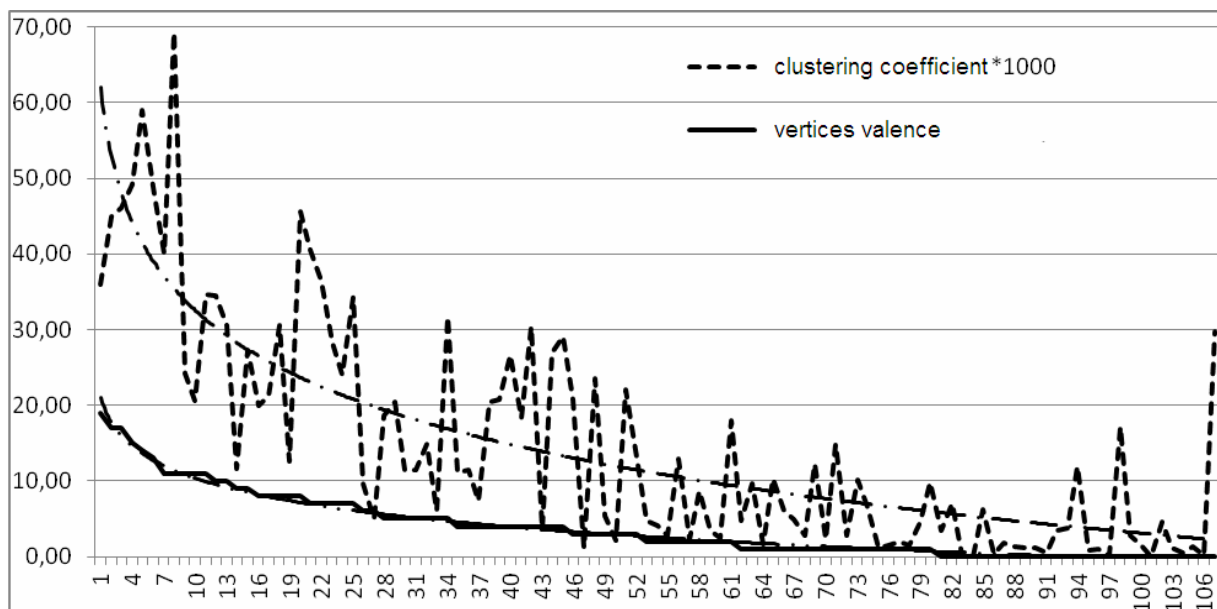


Fig. 4 The correlation of vertices graph distribution with clustering coefficient

In addition, it can be seen from figure 3 that 80 (74,77 %) people in the social graph are linked in a connectivity component, and 27 (by 25,23 %) components are separated from each other. If we remove all the vertices with the highest valences (>10) from the graph in figure 3, then the connectivity of the component will lose only 2,7 % of the remaining vertices. In other words, if “removing” the vertices of the social graph breaks down into individual clicks – this is one of the signs that “leader of opinions” is in the vertex of the social graph.

Correlated distribution coefficient of clustering and the distribution of valences of the vertices allow us to analyze social graphs to identify centers of clustering. While a large scatter (fig. 4) does not allow to carry out individual analysis of the graph vertices (people) in terms of clustering, but allows us to define how close a group of people is to the center of clustering.

Thus, the most important is the analysis of an index of the valence of the vertices in the task of identifying the orientation of the social graph and associated with the task application for individual analysis of the users of social networks and the identification of “opinion leaders”. In the definition of valences it is necessary to focus not only on the measure of friend-list and on the indicator of the vertices valence in a subgraph of the network with connectivity component.

3. Not oriented links in the society (method of detecting a critical situation)

The construction of a random graph in descending order of valence in fig. 3 as well as in the Watts–Strogatz model reproduces the cyclic closure of the social graph in the central part in the form of equitable relations, that is the relations between vertices with the same valence, and for this reason having no a pronounced orientation.

Fig. 5 shows the distribution of equitable relations to the parts of the graph with different valence.

It is clear from fig. 5 that the number of equal relations in the society gradually increases with increasing degree of vertices reaches a certain maximum and begins to decrease with increasing degrees of vertices. It is shown in fig. 6, that a gradual increase and a gradual decline show the ratio of the number of equitable relations to the number of vertices in the parts of graph with a certain valence of the vertices more evidently.

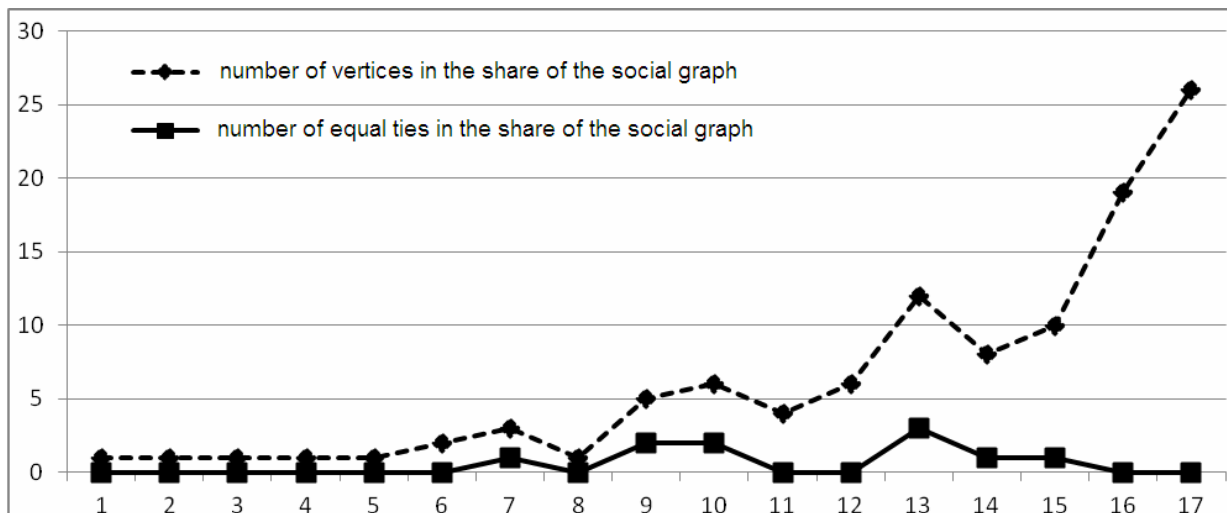


Fig. 5. The correlation between the quantity of equitable relations and the vertex valence in the parts of the graph

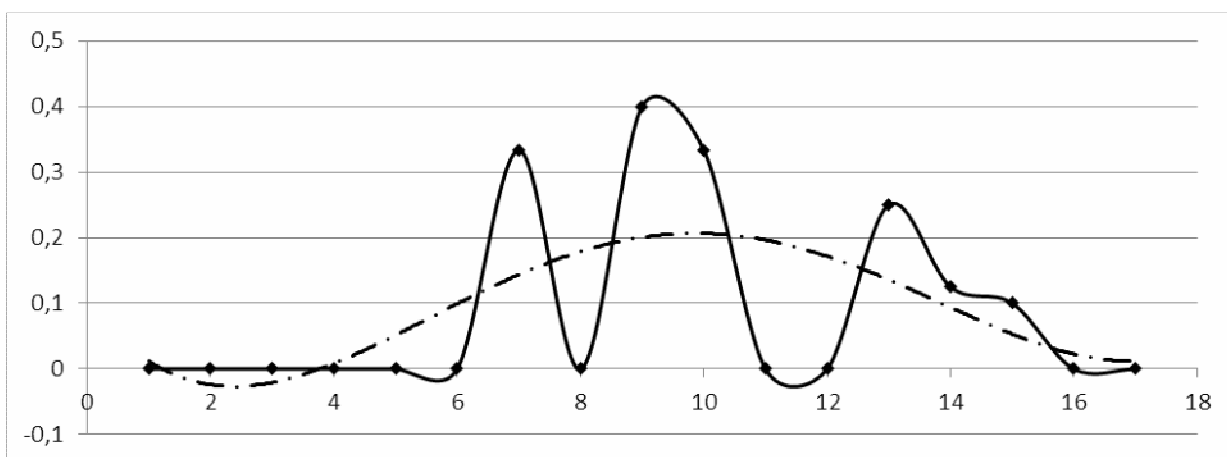


Fig. 6. The distribution of the ratio index of the number of equitable relations to the number of vertices in the parts of graph with a certain valence of the vertices

This distribution shows the evolution stages of relations formation of vertices in the social graph:

- 1) initially any vertex in the society has only some incoming links;
- 2) gradually the increasing of the number of incoming links process is growing;
- 3) the first equitable relations are forming;
- 4) the process of increasing equitable relations is growing;
- 5) the growth of the number of equitable relations changes to the growth of the number of outgoing relations;
- 6) equitable relations are disappearing, incoming relations are reducing, the growth of outgoing relations is taking place;
- 7) missing outgoing relations are missing completely, only the outgoing relations are in the vertex;
- 8) the number of outgoing relations is decreasing;
- 9) vertex is becoming completely isolated from the society.

The same process can capture the separate clusters of the society: new countries, new languages, isolated subcultures are supposed to be born through “the spin-off from the giant components”. Precisely this process of “spin-off” the subgraph from the connectivity components can be identified due to mass “breaking” relations, that is, by the reduction of the clustering coefficient and by the growth of the sparseness of the social graph. Such “spin-off” processes describe the critical situation and, in fact, they are their main manifestation. Checking the relation chains tearing is the fact of emergence of a critical situation, at the stage when nothing can be changed, because the society breaks down into separate

components. Knowing the evolutionary path of building the relations of vertices and parts of the society it is possible to track deviations from its normal development.

In this case, the most important role of the indicator in the pre-critical situation play just equitable relations between vertices with the same valence orientation, which are weakly expressed. If the experimentally determined norm of such equitable relations in the society does not exceed $\approx 5\%$, a significant excess of this norm may indicate the loss of the society equilibrium and the emergence of pre-critical situation. This occurs from the fact that equitable relations do not have a fixed orientation and for that reason the growth of their number deprives the social graph of the strict orientation and leads to the loss of controllability over the parts of the society with the highest index of valence.

References

1. Barabási L.-A., Albert R. Emergence of scaling in random networks. *Science*, 1999, Vol. 286, Issue 5439, pp. 509–512. DOI: 10.1126/science.286.5439.509
2. Barabási L.-A., Albert R., Jeong H. Scale-free characteristics of random networks: the topology of the world-wide web. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2000, Vol. 281, Issues 1–4, pp. 69–77. DOI: 10.1016/S0378-4371(00)00018-2
3. Bollobás B., Riordan O. Mathematical results on scale-free random graphs. *Handbook of Graphs and Networks: From the Genome to the Internet*, Weinheim: Wiley-VCH, 2003. pp. 1–34. DOI: 10.1002/3527602755.ch1
4. Stoimenow A. Enumeration of chord diagrams and an upper bound for Vassiliev invariants. *Journal of Knot Theory and Its Ramifications*, 1998, Vol. 7, Issue 1, pp. 93–114. DOI: 10.1142/S0218216598000073
5. Bollobás B., Riordan O. The diameter of a scale-free random graph. *Combinatorica*, 2004, Vol. 24, Issue 1, pp. 5–34. DOI: 10.1007/s00493-004-0002-2
6. Bollobás B., Riordan O., Spencer J., Tusnády G. The degree sequence of a scale-free random graph process. *Random Structures Algorithms*, 2001, Vol. 18, no. 3, pp. 279–290. DOI: 10.1002/rsa.1009
7. Kumar R., Raghavan P., Rajagopalan S., Sivakumar D., Tomkins A., Upfal E. Stochastic models for the web graph. *Proc. 41st Annual Symposium on Foundations of Computer Science*, 2000. DOI: 10.1109/SFCS.2000.892065
8. Kukushkin A.A., Bogomolov A.V., Ushakov I.B. Mathematical providing of estimation of material systems state. *Informacionnye tehnologii* (Information technologies), 2004, no. 7 (appendix), 32 p.
9. Bogomolov A.V., Gridin L.A., Kukushkin Yu.A., Ushakov I.B. *Diagnostika sostoyaniya cheloveka: matematicheskie podkhody* (Diagnosis of the human condition: mathematical approaches). Moscow, Meditsina Publ., 2003, 464 p.
10. Newman M.E.J., Watts D.J. Scaling and percolation in the small-world network model. *Phys. Rev. E*, 1999, Vol. 60, pp. 7332–7342. (arXiv: 9904419v2) DOI: 10.1103/physreve.60.7332
11. Garin E.V., Meshcheryakov R.V. Social graph of the society. *News of higher educational institutions. Sociology. Economy. Policy*, 2015, no. 4(47), pp. 11–14. (in Russ.).
12. Garin Y., Meshcheryakov R. Model of Socium Governance. *Problems of Management Theory and Practice – an international journal of the Research Institute of Management Problems*, 2017, no. 1, pp. 105–121. (in Russ.).

Received September 16, 2017

МЕТОД ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОРИЕНТАЦИИ СОЦИАЛЬНОГО ГРАФА ПО АНАЛИЗУ ВАЛЕНТНОСТИ ВЕРШИН В КОМПОНЕНТЕ СВЯЗНОСТИ

Е.В. Гарин, Р.В. Мещеряков

Томский университет систем управления и радиоэлектроники, г. Томск,
Российская Федерация
E-mail: mrv@tusur.ru

Данная работа является продолжением работ авторов по проблематике моделирования строения социума методом генерации случайных графов. В своих предыдущих работах авторы экспериментально доказали, что социальный граф имеет строгую ориентацию направления распространения информации от долей графа с высокой плотностью связей к долям графа, имеющим более низкую плотность связей. Авторами предлагался метод определения ориентации социального графа путем исследования соотношения количества исходящих связей к входящим. Этот метод нашел применение в анализе почтовых рассылок, но оказался практически не применим в анализе социальных сетей, так как подсчет входящих и исходящих связей требовал составления возмещённых социальных графов – затратной по времени и вычислительным ресурсам задачи, не имеющей на сегодняшний день решения за полиномиальное время.

Так как вопрос анализа социальных сетей представляет собой не только строго научный, но и практический интерес, авторами была разработана и апробирована методика определения ориентации социальных графов методом анализа числовых характеристик графа. Новый метод не требует детального анализа переписки пользователей социальных сетей, а оперирует открытой информацией пользователей – списком друзей (френд-лист).

Конечной целью данной работы авторов является разработка простых и действенных методов анализа социальных сетей на предмет выявления «лидеров мнения», путей распространения информации, в том числе пропагандирующих девиационные и зависимые формы поведения, выявления антисистем и отдельных закрытых сетевых сообществ, общего мониторинга состояния социальных систем.

Ключевые слова: социальный граф; случайные графы; числовые характеристики графов; ориентация социального графа.

Литература

1. Baraba'si, L.-A. Emergence of scaling in random networks / L.-A. Baraba'si, R. Albert // Science. – 1999. – Vol. 286, Issue 5439. – P. 509–512.
2. Baraba'si, L.-A. Scale-free characteristics of random networks: the topology of the world-wide web / L.-A. Baraba'si, R. Albert, H. Jeong // Physica A: Statistical Mechanics and its Applications. – 2000. – Vol. 281, Issues 1–4. – P. 69–77.
3. Bolloba's, B. Mathematical results on scale-free random graphs / B. Bolloba's, O. Riordan // Handbook of Graphs and Networks: From the Genome to the Internet. – Weinheim: Wiley-VCH, 2003. – P. 1–34.
4. Stoimenow, A. Enumeration of chord diagrams and an upper bound for Vassiliev invariants / A. Stoimenow // Journal of Knot Theory and Its Ramifications. – 1998. – Vol. 7, Issue 1. – P. 93–114.
5. Bolloba's, B. The diameter of a scale-free random graph / B. Bolloba's, O. Riordan // Combinatorica. – 2004. – Vol. 24, Issue 1. – P. 5–34.
6. The degree sequence of a scale-free random graph process / B. Bolloba's, O. Riordan, J. Spencer, G. Tusna'dy // Random Structures Algorithms. – 2001. – Vol. 18, № 3. – P. 279–290.
7. Stochastic models for the web graph / R. Kumar, P. Raghavan, S. Rajagopalan *et al.* // Proc. 41st Symposium on Foundations of Computer Science. – 2000.

8. Кукушкин, Ю.А. Математическое обеспечение оценивания состояния материальных систем / Ю.А. Кукушкин, А.В. Богомолов, И.Б. Ушаков // Информационные технологии. – 2004. – № 7 (приложение). – 32 с.

9. Диагностика состояния человека: математические подходы / А.В. Богомолов, Л.А. Гридин, Ю.А. Кукушкин, И.Б. Ушаков. – М.: Медицина, 2003. – 464 с.

10. Newman, M.E.J. Scaling and percolation in the small-world network model / M.E.J. Newman, D.J. Watts // Phys. Rev. E. – 1999. – Vol. 60. – P. 7332–7342. (arXiv: 9904419v2).

11. Гарин, Е.В. Социальный граф общества / Е.В. Гарин, Р.В. Мещеряков // Известия высших учебных заведений. Социология. Экономика. Политика. – 2015. – № 4(47). – С. 11–14.

12. Гарин, Е.В. Модель управления социумом / Е.В. Гарин, Р.В. Мещеряков // «Проблемы теории и практики управления» – международный журнал научно-исследовательского института проблем управления: раздел «Управление социальным развитием». – 2017. – № 1. – С. 105–121.

Поступила в редакцию 16 сентября 2017 г.

СРАВНЕНИЕ НЕСКОЛЬКИХ ПРИЗНАКОВ УСТОЙЧИВОСТИ ЛИНЕЙНЫХ РАЗНОСТНЫХ УРАВНЕНИЙ

Д.А. Комиссарова¹, М.М. Кипнис²

¹Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: komissarovada@susu.ru

²Южно-Уральский государственный гуманитарно-педагогический университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: mmkipnis@gmail.com

Сравниваются признаки асимптотической устойчивости линейных разностных уравнений авторов публикации и некоторые известные признаки других авторов. Достаточные условия авторов лучше, чем известные ранее признаки. Конкурирующими являются признаки авторов и китайских исследователей. Признаки Кипниса и Комиссаровой содержат линейные ограничения на коэффициенты уравнения, а в работе китайских исследователей были найдены нелинейные условия асимптотической устойчивости. Существуют области в пространстве положительных коэффициентов уравнения, устойчивость в которых диагностируется с помощью признаков авторов, но не выявляется признаком китайских исследователей, и наоборот. Показаны области гарантированной устойчивости, которые выявляются различными признаками, на примере уравнения с двумя запаздываниями. Указаны классы разностных уравнений, в которых признаки Кипниса и Комиссаровой заведомо лучше. Доказаны соответствующие теоремы. Приведены примеры, иллюстрирующие возможности применения различных признаков.

Ключевые слова: устойчивость; разностные уравнения.

1. Основные известные результаты

Рассмотрим линейное разностное уравнение порядка k

$$x_n = x_{n-1} - \sum_{s=1}^k a_s x_{n-s}, \quad (1)$$

где $a_s \in \mathbb{R}$, $a_s \geq 0$ ($1 \leq s \leq k$). Мы называем уравнение (1) асимптотически устойчивым, если все его решения стремятся к нулю при $n \rightarrow \infty$. Цель работы – сравнить силу нескольких признаков устойчивости уравнения (1).

Авторы настоящей статьи опубликовали следующий результат [1].

Теорема 1.1. Если $a_s \geq 0$ ($1 \leq s \leq k$) и

$$0 < \sum_{s=1}^k \frac{a_s}{2 \sin \frac{\pi}{2(2s-1)}} < 1, \quad (2)$$

то уравнение (1) асимптотически устойчиво.

Теорема 1 является многомерным обобщением известного результата Левина и Мэя [2]. Из теоремы 1.1 вытекает следующий результат.

Теорема 1.2 ([1]). Если $a_s \geq 0$ ($1 \leq s \leq k$) и

$$0 < \sum_{s=1}^k s a_s \leq \frac{\pi}{2}, \quad (3)$$

то уравнение (1) асимптотически устойчиво.

Теорема 1.2 усиливает результаты работ [3] и [4], в которых вместо $\frac{\pi}{2}$ в неравенстве (3) были числа 1 и $1 + \frac{1}{e}$ соответственно, а также результат статьи Танга и Джианга [5] с числом $\frac{3}{2}$ вместо $\frac{\pi}{2}$ в неравенстве (3).

Теорема 1.3 ([1]). Если $a_s \geq 0$ ($1 \leq s \leq k$) и

$$0 < \sum_{s=1}^k sa_s < 2k \sin \frac{\pi}{2(2k-1)}, \quad (4)$$

то уравнение (1) асимптотически устойчиво.

Признак устойчивости теоремы 1.3 сильнее признака теоремы 1.2, но обладает тем недостатком, что его правая часть зависит от порядка уравнения (1). В то же время признак теоремы 1.3 слабее признака теоремы 1.1. Теорема 1.1 в некотором смысле не может быть улучшена. Следующая теорема подтверждает это высказывание.

Теорема 1.4 ([1]). Пусть $A_s \geq 0$ ($1 \leq s \leq k$), причем существует такое s ($1 \leq s \leq k$), что $A_s > 2 \sin \frac{\pi}{2(2s-1)}$. Тогда найдется точка (a_1, \dots, a_k) такая, что $a_s \geq 0$ ($1 \leq s \leq k$), $0 < \sum_{s=1}^k \frac{a_s}{A_s} < 1$ и уравнение (1) с коэффициентами a_1, \dots, a_k неустойчиво.

Замечание. Неулучшаемость констант в условии (2) теоремы 1.1 не свидетельствует о необходимости условия (2) устойчивости уравнения (1). Как показано в работе [6], для некоторых уравнений симплекс устойчивости, определенный неравенством (2), заполняет лишь малую часть области устойчивости.

Постоянная $\frac{\pi}{2}$ в теореме 1.2 и правая часть неравенства (4) в теореме 1.3 также не могут быть улучшены (см. [1]). Приведем теперь для сравнения результаты Кука, Дьери и Хартунга.

Теорема 1.5 (Кук–Дьери, [3]). Если $a_s \geq 0$ ($1 \leq s \leq k$) и

$$0 < \sum_{s=1}^k sa_s < 1, \quad (5)$$

то уравнение (1) асимптотически устойчиво.

Теорема 1.6 (Дьери–Хартунг, [4]). Если $a_s \geq 0$ ($1 \leq s \leq k$) и

$$0 < \sum_{s=1}^k sa_s < 1 + \frac{1}{e}, \quad (6)$$

то уравнение (1) асимптотически устойчиво.

Поскольку $1 < 1 + \frac{1}{e} < \frac{\pi}{2}$, теорема 1.2 сильнее теорем 1.5 и 1.6.

2. Сравнение с работой Танга и Джанга

Результаты работы [5] Танга и Джанга конкурируют с ранее указанными в настоящей статье признаками.

Теорема 2.1 (Танг–Джанг, [5]). Уравнение (1) асимптотически устойчиво, если

$$\sum_{s=1}^k sa_s < \begin{cases} 1 + \mu_0(1 - \mu_0/4), & 1 < \mu_0 < 2; \\ 1 + 2\mu_0 - 5\mu_0^2/4, & 1/2 < \mu_0 \leq 1; \\ 3/2 + \mu_0(2 - \mu_0)/4, & 0 < \mu_0 \leq 1/2, \end{cases} \quad (7)$$

где $\mu_0 = \sum_{s=1}^k a_s$.

Условие (7) выполняется, если $0 < \sum_{s=1}^k sa_s < \frac{3}{2}$, поэтому теорема 2.1 сильнее теорем 1.5 и 1.6.

Сравним теперь результаты Танга–Джанга с результатами работы [1] авторов настоящей статьи.

Пример 1. Рассмотрим уравнение $x_n = x_{n-1} - 1,86x_{n-1} - 0,01x_{n-2}$. В этом случае $\sum_{s=1}^k sa_s = 1,98 > \frac{\pi}{2}$. Поэтому признак теоремы 1.2 не может быть применен. Теорема 1.1 также не

применима, поскольку $\sum_{s=1}^k \frac{a_s}{2 \sin \frac{\pi}{2(2s-1)}} = 1,003 > 1$. Рассмотрим признак Танга–Джианга. Согласно

но (7), $\mu_0 = 1,87$ и $1 + \mu_0(1 - \mu_0/4) = 1,996 > 1,98$. Условие теоремы 2.1 выполнено, данное уравнение асимптотически устойчиво. Таким образом, для примера 1 теорема 2.1 оказалась эффективнее теоремы 1.1.

Рассмотрим разностное уравнение с двумя запаздываниями

$$x_n = x_{n-1} - ax_{n-m} - bx_{n-k}, \quad (8)$$

где $a, b \in \mathbb{R}$, запаздывания $m, k \in \mathbb{N}$, причем $m \leq k$.

Рисунок показывает, как теоремы 1.1, 1.2 и 2.1 обнаруживают области устойчивости уравнения (8) при $m=1, k=12$.

Рисунок показывает некоторые области в пространстве коэффициентов уравнения (8), устойчивость в которых гарантируется теоремой 1.1, но не теоремой 2.1, и наоборот. Далее мы намерены показать, что при $a_1 = 0$ признак теоремы 1.1 сильнее признака Танга–Джианга.

Лемма 2.1. Для любых натуральных чисел $s \geq s_0$

$$\sin \frac{\pi}{2(2s-1)} \geq \frac{2(2s_0-1) \sin \frac{\pi}{2(2s_0-1)}}{2s-1}.$$

Доказательство. Ввиду выпуклости функции $\sin x$ на $\left[0; \frac{\pi}{2}\right]$ верно неравен-

ство $\sin x \geq \frac{\sin a}{a} x$ при $x \in [0; a]$, $0 < a \leq \frac{\pi}{2}$. Поэтому для всех $s \geq s_0$

$$\sin \frac{\pi}{2(2s-1)} \geq \frac{2(2s_0-1) \sin \frac{\pi}{2(2s_0-1)}}{\pi} \cdot \frac{\pi}{2(2s-1)} = \frac{2(2s_0-1) \sin \frac{\pi}{2(2s_0-1)}}{2s-1}.$$

Лемма доказана.

Теорема 2.2. Если $a_1 = 0$, то из неравенства (7) следует неравенство (2).

Доказательство. По лемме 2.1 имеем

$$\sum_{s=2}^k \frac{a_s}{2 \sin \frac{\pi}{2(2s-1)}} \leq \sum_{s=2}^k \frac{a_s}{3} (2s-1) = \mu_0 + \frac{2}{3} \sum_{s=2}^k (s-2) a_s. \quad (9)$$

Пусть $1 < \mu_0 < 2$. Из (7) следует, что

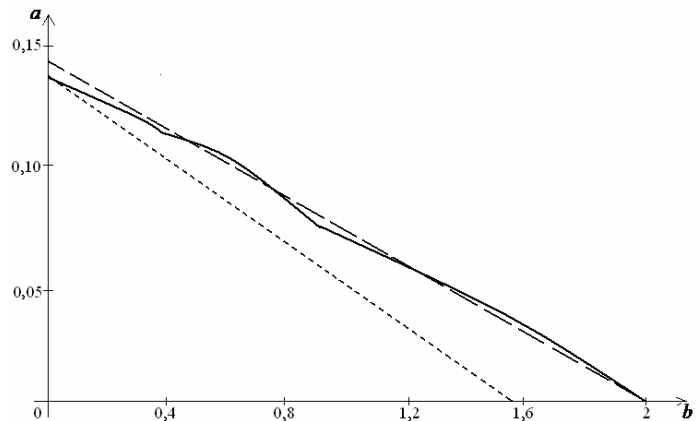
$$2\mu_0 + \sum_{s=3}^k (s-2) a_s < 1 + \mu_0 \left(1 - \frac{\mu_0}{4}\right).$$

Отсюда $\mu_0^2 + 4\mu_0 - 4 < 0$. Тогда $\mu_0 < -2 + 2\sqrt{2} \approx 0,83 < 1$, противоречие. Остаются два случая.

Случай 1: $\frac{1}{2} < \mu_0 \leq 1$. Из (7) имеем

$$2\mu_0 + \sum_{s=3}^k (s-2) a_s < 1 + 2\mu_0 - \frac{5}{4} \mu_0^2.$$

Отсюда



Области гарантированной устойчивости уравнения (8) при $m=1, k=12$. Пунктирная линия – граница симплекса (3), штриховая линия – граница симплекса (2), сплошная линия – граница области Танга–Джианга

$$\sum_{s=3}^k (s-2)a_s < 1 - \frac{5}{4}\mu_0^2. \quad (10)$$

Ввиду (9) и (10) при любом μ_0 получаем

$$\sum_{s=2}^k \frac{a_s}{2 \sin \frac{\pi}{2(2s-1)}} < \mu_0 + \frac{2}{3} - \frac{5}{6}\mu_0^2 < 1.$$

Случай 2: $0 < \mu_0 \leq \frac{1}{2}$. Из (7) имеем

$$2\mu_0 + \sum_{s=3}^k (s-2)a_s < \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\mu_0 - \frac{1}{4}\mu_0^2.$$

Отсюда

$$\sum_{s=3}^k (s-2)a_s < \frac{3}{2} - \frac{3}{2}\mu_0 - \frac{1}{4}\mu_0^2. \quad (11)$$

Ввиду (9) и (11) получаем

$$\sum_{s=2}^k \frac{a_s}{2 \sin \frac{\pi}{2(2s-1)}} < \mu_0 + 1 - \mu_0 - \frac{1}{6}\mu_0^2 = 1 - \frac{1}{6}\mu_0^2 < 1$$

при любом $\mu_0 > 0$. Теорема доказана.

Пример 2. Рассмотрим уравнение $x_n = x_{n-1} - 0,9x_{n-1} - 0,05x_{n-3}$.

В этом случае $\sum_{s=1}^k sa_s = 1,95$. Так как $1,95 > \frac{\pi}{2}$ и $1,95 > 6 \sin \frac{\pi}{10} \approx 1,854$, теоремы 1.2 и 1.3 неприменимы для исследования устойчивости этого уравнения. Поскольку $\sum_{s=1}^k \frac{a_s}{2 \sin \frac{\pi}{2(2s-1)}} \approx 0,981 < 1$, согласно теореме 1.1 данное уравнение асимптотически устойчиво.

Имеем $\mu_0 = 0,95$ и $1 + 2\mu_0 - 5\mu_0^2/4 = 1,77 < 1,95$, условие (7) не выполняется. Значит, с помощью признака Танга–Джианга нельзя сделать выводов об устойчивости.

Укажем класс уравнений, для которых признаки теорем 1.2 и 1.3 сильнее признака Танга–Джианга.

Теорема 2.3. Если $a_1 = a_2 = \dots = a_{10} = 0$, то из неравенства (7) следует неравенство (3).

Доказательство. Предположим, что $1 < \mu_0 < 2$. Из (7) получаем

$$11\mu_0 + \sum_{s=12}^k (s-11)a_s < 1 + \mu_0 \left(1 - \frac{\mu_0}{4}\right).$$

Отсюда $\mu_0^2 + 40\mu_0 - 4 < 0$. Тогда $\mu_0 < -20 + 2\sqrt{101} \approx 0,1 < 1$, противоречие.

Теперь предположим, что $\frac{1}{2} < \mu_0 \leq 1$. Из (7) получим

$$11\mu_0 + \sum_{s=12}^k (s-11)a_s < 1 + 2\mu_0 - \frac{5}{4}\mu_0^2.$$

Отсюда $5\mu_0^2 + 36\mu_0 - 4 < 0$. Тогда $\mu_0 < \frac{-18 + \sqrt{344}}{5} \approx 0,11 < \frac{1}{2}$, противоречие.

Остается случай $0 < \mu_0 \leq \frac{1}{2}$. Из (7) имеем

$$11\mu_0 + \sum_{s=12}^k (s-11)a_s < \frac{3}{2} + \frac{1}{2}\mu_0 - \frac{1}{4}\mu_0^2.$$

Отсюда $\mu_0^2 + 42\mu_0 - 6 < 0$. Тогда $\mu_0 < -21 + \sqrt{447} \approx 0,142$.

Поскольку функция $\frac{3}{2} + \frac{1}{2}\mu_0 - \frac{1}{4}\mu_0^2$ возрастает на $\left(0; \frac{1}{2}\right]$, из (7) получаем

$$\sum_{s=1}^k sa_s < \frac{3}{2} + \frac{1}{4}(-21 + \sqrt{447})(23 - \sqrt{447}) \approx 1,556 < \frac{\pi}{2}.$$

Теорема доказана.

Так как $\frac{\pi}{2} < 2k \sin \frac{\pi}{2(2k-1)}$ при любом натуральном k , получаем следствие:

Следствие теоремы 2.3. Если $a_1 = a_2 = \dots = a_{10} = 0$, то из неравенства (7) следует неравенство (4).

Теорема 2.3 и следствие из нее фиксируют преимущество любой из теорем 1.1, 1.2, 1.3 перед признаком Танга–Джианга для разностных уравнений с большими запаздываниями.

Следующий пример показывает, что теорема 2.3 в некотором смысле неумлучшаема.

Пример 3. Рассмотрим уравнение $x_n = x_{n-1} - 1572,4 \cdot 10^{-4} x_{n-10} - 0,0007 \cdot 10^{-4} x_{n-480}$.

Это уравнение асимптотически устойчиво, поскольку (см. (7)) $\mu_0 = 1572,4007 \cdot 10^{-4}$ и $\frac{3}{2} + \mu_0(2 - \mu_0)/4 \approx 15724,3893 \cdot 10^{-4} > \sum_{s=1}^k sa_s = 15724,336 \cdot 10^{-4}$. Но неравенство (3) не выполнено, так как $\sum_{s=1}^k sa_s = 15724,336 \cdot 10^{-4} > \frac{\pi}{2}$.

Замечание. Признак Танга–Джианга и теорема 1.1 требуют для устойчивости уравнения (1), чтобы сумма коэффициентов, обозначенная посредством μ_0 , была меньше 2. Но следующий пример показывает, что уравнение (1) может быть устойчивым и при $\mu_0 \geq 2$.

Пример 4. Рассмотрим уравнение

$$x_n = x_{n-1} - (1,9x_{n-1} + 0,8x_{n-2} + 0,7x_{n-3} + 0,6x_{n-4}). \quad (12)$$

В данном случае $\mu_0 = 3$. Согласно результатам Энестрема–Какейя 1892 г. [7], уравнение $x_n + \sum_{s=1}^k a_s x_{n-s} = 0$ устойчиво, если $1 \geq a_1 \geq a_2 \geq \dots \geq a_k > 0$. Уравнение (12) удовлетворяет этому условию, поэтому оно асимптотически устойчиво.

Работа выполнена при поддержке ФГБОУ ВО «Красноярский государственный педагогический университет им. В.П. Астафьева», договор № 16-746.

Литература

1. Kipnis, M.M. A note on explicit stability conditions for autonomous higher order difference equations / M.M. Kipnis, D.A. Komissarova // Journal of Difference Equations and Applications. – 2007. – Vol. 13, № 5. – P. 457–461.
2. Levin, S.A note on difference-delay equations / S. Levin, R. May // Theoret. Popul. Biol. – 1976. – Vol. 9, № 2. – P. 178–187.
3. Cooke, K.L. Numerical approximation of the solutions of delay differential equations on an infinite interval using pieewise constant arguments / K.L. Cooke, I. Györi // Computers & Mathematics with Applications. – 1994. – Vol. 28. – Issue 1-3. – P. 81–92.
4. Györi, I. Stability in delay perturbed differential and difference equations / I. Györi, F. Hartung // Fields Institute Communications. – 2001. – Vol. 29. – P. 181–194.
5. Tang, X.H. Asymptotic behavior of Volterra difference equations / X.H. Tang, Z. Jiang // Journal of Difference Equations and Applications. – 2007. – Vol. 13, № 1. – P. 25–40.
6. Левицкая, И.С. Область устойчивости линейного разностного уравнения с двумя запаздываниями / И.С. Левицкая // Известия Челябинского научного центра. – 2004. – Вып. 3(24). – С. 12–16.
7. Прасолов, В.В. Многочлены / В.В. Прасолов. – М.: МЦ МНО, 2001. – 336 с.

Поступила в редакцию 4 июля 2017 г.

**COMPARISON OF SEVERAL STABILITY CONDITIONS
FOR LINEAR DIFFERENCE EQUATIONS****D.A. Komissarova¹, M.M. Kipnis²**¹ South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: komissarovada@susu.ru

² South Ural State Pedagogical University for Humanities, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: mmkipnis@gmail.com

The paper compares the asymptotic stability criteria for linear difference equations, and some other well-known criteria found by the authors of the publication. Sufficient conditions given by the authors are better than the known ones. Criteria by the authors compete with the criteria of the Chinese researchers. The criteria of Kipnis and Komissarova consist of the linear constraints on the coefficients of the equations, while in the work of the Chinese researchers nonlinear conditions for asymptotic stability were found. There are domains in the space of positive coefficients of an equation, stability of which is revealed by the authors' criteria, but is not detected by the Chinese researchers test, and vice versa. The areas of guaranteed stability, which are revealed by different conditions, are shown for the linear difference equation with two delays. The classes of the difference equations are given in which the Kipnis and Komissarova criteria are certainly better. The corresponding theorems are proved. Examples illustrating the possibilities of using various criteria are given.

Keywords: stability; difference equations.

References

1. Kipnis M.M., Komissarova D.A. A note on explicit stability conditions for autonomous higher order difference equations. *J. Difference Equ. Appl.*, 2007, Vol. 13, no. 5, pp. 457–461. DOI: 10.1080/10236190601132933
2. Levin S., May R. A note on difference-delay equations. *Theoret. Popul. Biol.*, 1976, Vol. 9, no. 2, pp. 178–187. DOI: 10.1016/0040-5809(76)90043-5
3. Cooke K.L., Györi I. Numerical approximation of the solutions of delay differential equations on an infinite interval using pieewise constant arguments. *Comp. Math. Appl.*, 1994, Vol. 28, Issue 1-3, pp. 81–92. DOI: 10.1016/0898-1221(94)00095-6
4. Györi I., Hartung F. Stability in delay perturbed differential and difference equations. *Fields Institute Communications*, 2001, Vol. 29, pp. 181–194. <http://www.ams.org/books/fic/029/14> DOI: 10.1090/fic/029
5. Tang X.H., Jiang Z. Asymptotic behavior of Volterra difference equations. *J. Difference Equ. Appl.*, 2007, Vol. 13, no. 1, pp. 25–40. DOI: 10.1080/10236190601008810
6. Levitskaya I.S. *Izvestiya Chelyabinskogo nauchnogo tsentra*, 2004, no. 3(24), pp. 12–16. (in Russ). http://csc.ac.ru/news/2004_3/2004_3_1_3.zip
7. Prasolov V.V. *Polynomials*. Springer Berlin Heidelberg, 2004, 301 p. DOI: 10.1007/978-3-642-03980-5

Received July 4, 2017

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ ФУНКЦИИ ИСТОЧНИКА В КВАЗИЛИНЕЙНЫХ ПАРАБОЛИЧЕСКИХ ЗАДАЧАХ С ТОЧЕЧНЫМИ УСЛОВИЯМИ ПЕРЕОПРЕДЕЛЕНИЯ

С.Г. Пятков, В.В. Ротко

Югорский государственный университет, г. Ханты-Мансийск, Российская Федерация

E-mail: s_pyatkov@ugrasu.ru

Рассматривается вопрос о корректности в пространствах Соболева обратной задачи об определении функции источников в квазилинейной параболической системе второго порядка. Проблемы подобного вида возникают при описании процессов тепломассопереноса, диффузионных процессов, процессов фильтрации и во многих других областях. Главная часть оператора линейна. Незвестные функции, зависящие от времени, входят в нелинейную правую часть. В том числе в этот класс задач входят и коэффициентные обратные задачи об определении младших коэффициентов в параболическом уравнении или системе. В качестве условий переопределения рассматриваются значения решения в некотором наборе внутренних точек. В качестве краевых условий берутся условия Дирихле или условия задачи с кривой производной. Задача рассматривается в ограниченной области с гладкой границей. Однако результаты допускают обобщения и на случай неограниченных областей таких, в которых соответствующие теоремы о разрешимости прямой задачи имеют место. Приведены условия, гарантирующие локальную по времени корректность задачи в классах Соболева. Условия на данные задачи минимальны. Полученные результаты являются точными. Задача сводится к операторному уравнению, существование решения которого доказывается при помощи априорных оценок и теоремы о неподвижной точке. Полученное решение обладает всеми обобщенными производными, входящими в уравнение, принадлежащими пространству L_p с $p > n + 2$ и обладает необходимой дополнительной гладкостью в некоторой окрестности точек переопределения.

Ключевые слова: параболическое уравнение; обратная задача; тепломассоперенос; краевая задача; функция источников.

Введение

Мы рассматриваем вопрос об определении вместе с решением правой части специального вида или младших коэффициентов в параболических уравнениях и системах. Пусть G – область в R^n с границей Γ класса C^2 и $Q = (0, T) \times G$. Параболическое уравнение имеет вид

$$Lu = u_t + A(t, x, D)u = f(x, t, u, \nabla u, \bar{q}), \quad (t, x) \in Q, \quad (1)$$

где A – матричный эллиптический оператор вида $A(t, x, D)u = -\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(t, x)u_{x_i x_j}$, $a_{ij}, a_i - r_0 \times r_0$ матрицы, u – вектор длины r_0 и $\bar{q}(t) = (q_1(t), q_2(t), \dots, q_m(t))$ – неизвестные функции, подлежащие определению вместе с решением u . Система (1) дополняется начальными и граничными условиями

$$u|_{t=0} = u_0, \quad Bu|_S = g, \quad S = (0, T) \times \Gamma, \quad (2)$$

где $Bu = \sum_{i=1}^n \gamma_i(t, x)u_{x_i} + \sigma(t, x)u$ или $Bu = u$, $n_i - i$ -я координата внешней единичной нормали к Γ и $\gamma_i(t, x), \sigma(t, x) \in C^1(\bar{S})$. Условия переопределения записываются в виде

$$u(x_i, t) = \psi_i(t), \quad i = 1, 2, \dots, r. \quad (3)$$

Обратная задача состоит в нахождении решения u уравнения (1) и функций $q_i(t)$ ($i = 1, 2, \dots, m$ ($m = rr_0$)) по данным (2), (3).

Проблемы подобного вида возникают при описании процессов тепломассопереноса, диффузионных процессов, процессов фильтрации и во многих других областях (см. [1]). Прежде всего,

мы сошлемся на работу [2], где получена теорема существования и единственности решений задачи (1)–(3) в пространствах Гельдера в случае $r_0 = 1$, $r = 1$ и линейной по своим аргументам u , ∇u функции f . В случае $n = 1$, $r = 1$ и $G = R$ аналогичный результат в получен в работах [3, 4]. В работах [5, 6] была рассмотрена также и задача об определении младшего коэффициента в параболическом уравнении. В работе [7] (см. также [8]) была рассмотрена линейная обратная задача об определении функции источников в случай задачи Коши для операторно-дифференциального уравнения первого порядка $u_t + Au = f(t)z$ с условием переопределения вида $\Phi(u) = \psi(t)$, где Φ – некоторый функционал. Задача вида (1)–(3) входит в класс таких задач, при определенном выборе функционального пространства в котором ищется решение и в случае линейности задачи. Более общие теоремы о разрешимости абстрактных задач такого вида в квазилинейном случае получены в монографии [9]. Однако стоит отметить, что результаты [9] применимы к задаче (1)–(3) в случае функции g , зависящей только от функции u , но не от ∇u , и в случае краевых условий таких, что область определения оператора L не зависит от времени. Кроме того, даже в этом случае использование этих результатов приводит к излишним условиям гладкости и согласования на данные задачи. Ряд задач, входящих в класс (1), был рассмотрен в работе [10]. Отметим, что численные методы решения различных модельных задач, входящих в класс (1)–(3), рассматривались, например, в работах [11, 12] и многих других. В частности, в работе [12] рассматривалась обратная задача (1)–(3) об определении функции источника для квазилинейной системы параболических уравнений.

Мы получим локальную теорему о разрешимости задачи при минимальных (в определенном смысле) условиях на данные.

Опишем содержание работы. В первом параграфе описаны условия на данные задачи и сформулированы основные результаты. Во втором параграфе приведено их доказательство. Обозначения функциональных пространств стандартные (см., например, [13]).

1. Определения, обозначения и вспомогательные результаты

Пусть E – банахово пространство. Символом $L_p(G; E)$ (G – область в R^n) обозначаем пространство сильно измеримых функций, определенных на G , со значениями в E , наделенное нормой $\| \| u(x) \| \|_E \|_{L_p(G)}$ [13]. Мы также используем пространства Гельдера $C^\alpha(\bar{G})$. Обозначения $W_p^s(G; E)$, $W_p^s(Q; E)$ пространств Соболева являются стандартными (см. определения в [13, 14]). Если $E = C$ ($E = R$) или $E = C^n$ ($E = R^n$), тогда последнее пространство обозначается через $W_p^s(Q)$. Аналогично используем обозначения $W_p^s(G)$ или $C^\alpha(\bar{G})$ вместо $W_p^s(G; E)$ или $C^\alpha(\bar{G}; E)$. Таким образом, включение $u \in W_p^s(G)$ (или $u \in C^\alpha(\bar{G})$) для данной вектор-функции $u = (u_1, u_2, \dots, u_k)$ означает, что каждая из ее компонент u_i принадлежит $W_p^s(G)$ (или $C^\alpha(\bar{G})$). В этом случае норма вектора есть просто сумма норм координат. То же самое соглашение принимаем для матриц-функций. Для интервала $J = (0, T)$ положим $W_p^{s,r}(Q) = W_p^r(J; L_p(G)) \cap L_p(J; W_p^s(G))$. Соответственно, $W_p^{s,r}(S) = W_p^r(J; L_p(\Gamma)) \cap L_p(J; W_p^s(\Gamma))$. Аналогично определяем пространство Гельдера $C^{r,s}(\bar{Q})$.

Пусть $B_\delta(x_i)$ – шар радиуса δ с центром в точке x_i . Далее мы используем следующие обозначения: $Q^\tau = (0, \tau) \times G$, $S^\gamma = (0, \gamma) \times \Gamma$. Дан набор точек $\{x_j\}$ из (3), параметр $\delta > 0$ назовем допустимым, если $\overline{B_\delta(x_i)} \subset G$, $\overline{B_\delta(x_i)} \cap \overline{B_\delta(x_j)} = \emptyset$ для $i \neq j$, $i, j = 1, 2, \dots, r$. Пусть $G_\delta = \cup_i B_\delta(x_i)$, $Q_\delta = (0, T) \times G_\delta$, и $Q_\delta^\tau = (0, \tau) \times G_\delta$.

Рассмотрим задачу (1)–(2) и сформулируем один вспомогательный результат. Мы будем предполагать, что у нас выполнены условия на коэффициенты A :

$$a_{ij} \in C(\bar{Q}) \cap L_\infty(0, T; W_p^s(G_\delta)), p > n + 2, \gamma_i, \sigma \in C^1(\bar{S}), i, j = 1, 2, \dots, n. \quad (4)$$

для некоторого допустимого $\delta > 0$ и $s \in (n/p, 1]$. Мы также предполагаем, что L – параболический оператор и выполнено условие Лопатинского. Сформулируем эти условия. Рассмотрим матрицу $A(t, x, \xi) = -\sum_{i,j=1}^n a_{ij}(t, x) \xi_i \xi_j$ ($\xi \in R^n$) и предположим, что найдется постоянная $\delta_1 > 0$, такая, что корни p полинома $\det(A(t, x, i\xi) + pE) = 0$ (E – единичная матрица) удовлетворяют условию

$$\operatorname{Re} p \leq -\delta_1 |\xi|^2 \quad \forall \xi \in R^n \quad \forall (x, t) \in Q. \quad (5)$$

Пусть $B_0 u = u$ в случае условий Дирихле в (2) и $B_0 u = \sum_{j=1}^n \gamma_j \partial_{x_j} u$ в противном случае. Условие Лопатинского может быть записано в виде: для любой точки $(t_0, x_0) \in S$ и операторов $A(x, t, D)$ и $B_0(x, t, D)$, записанных в локальной системе координат y в этой точке (ось y_n направлена по нормали к S , и оси y_1, \dots, y_{n-1} лежат в касательной плоскости в точке (x_0, t_0)), система

$$(\lambda E + A_0(x_0, t_0, i\xi', \partial_{y_n}))v(z) = 0, \quad B_0(x_0, t_0, i\xi', \partial_{y_n})v(0) = h_j, \quad (6)$$

где $\xi' = (\xi_1, \dots, \xi_{n-1})$, $y_n \in R^+$, имеет единственное решение из $C(\bar{R}^+)$, ограниченное на бесконечности при всех $\xi' \in R^{n-1}$, $|\arg \lambda| \leq \pi/2$, и $h_j \in C$ таких, что $|\xi'| + |\lambda| \neq 0$. Мы также предполагаем, что

$$u_0(x) \in W_p^{2-2/p}(G), \quad g \in W_p^{2k_0, k_0}(S), \quad B(x, 0)u_0(x)|_\Gamma = g(x, 0) \quad \forall x \in \Gamma, \quad (7)$$

где $k_0 = 1 - 1/2p$ в случае условия Дирихле и $k_0 = 1/2 - 1/2p$ в противном случае,

$$u_0(x) \in W_p^{2+s-2/p}(G_\delta) \quad \text{для некоторого допустимого } \delta > 0 \text{ и } s \in (n/p, 1]. \quad (8)$$

Даны постоянные $\delta_1 < \delta_2 < \delta$. Построим вспомогательную функцию $\varphi \in C_0^\infty(G_\delta)$ такую, что $\varphi \equiv 1$ в области G_{δ_1} и $\varphi \equiv 0$ в $G_\delta \setminus G_{\delta_2}$.

Теорема 1. Пусть выполнены условия (4)–(8) для некоторого допустимого $\delta > 0$ и $s \in (n/p, 1]$, $f \in L_p(Q^\tau)$, $f\varphi \in L_p(0, \tau; W_p^s(G_\delta))$ и $\tau \in (0, T]$. Тогда существует единственное решение $u \in W_p^{2,1}(Q^\tau)$ задачи

$$Lu = f \quad ((x, t) \in Q), \quad u|_{t=0} = u_0(x), \quad Bu|_S = g. \quad (9)$$

Причем $\varphi_t \in L_p(0, \tau; W_p^s(G_\delta))$, $\varphi u \in L_p(0, \tau; W_p^{2+s}(G_\delta))$. Если $g \equiv 0$, $u_0 \equiv 0$, то справедлива оценка

$$\|u\|_{W_p^{2,1}(Q^\tau)} + \|\varphi u_t\|_{L_p(0, \tau; W_p^s(G_\delta))} + \|\varphi u\|_{L_p(0, \tau; W_p^{2+s}(G_\delta))} \leq c[\|f\|_{L_p(Q^\tau)} + \|\varphi f\|_{L_p(0, \tau; W_p^s(G_\delta))}], \quad (10)$$

где постоянная c не зависит от f , решения u и $\tau \in (0, T]$.

Доказательство. Основное утверждение теоремы известно, см., например, [15]. Дополнительная гладкость по существу вытекает из известных результатов о внутренней гладкости решений параболических и эллиптических задач (см. [15]).

2. Основные результаты

В этом параграфе мы приведем и докажем основные результаты этой работы. Предположим, что условия (4)–(8) выполнены для некоторого допустимого параметра $\delta > 0$. Положим $R_1 = 2(\|u_0\|_{C(\bar{G})} + \|\nabla u_0\|_{C(\bar{G})})$. Определим шар $B_1 = \{(u, p) : |u| + |p| \leq R_1\}$, где u – вектор длины r_0 и p – $r_0 \times n$ –матрица. В качестве величин $|u|, |p|$ соответственно берем сумму модулей координат и модулей элементов матрицы. Опишем условия на функцию f в (1). Мы будем требовать, что

$$1. f(x, t, u, p, q) \in C(B_1 \times R^m; L_p(Q)).$$

2. Найдутся функции $\Phi_0 \in L_p(Q), \Phi_1, \Phi_2 \in L_\infty(0, T; L_p(G))$ такие, что $|f(x, t, u_1, p_1, q_1) - f(x, t, u_2, p_2, q_2)| \leq (|\Phi_0| + (|q_1| + |q_2|)|\Phi_1|)(|u_1 - u_2| + |p_1 - p_2|) + |\Phi_2| \|q_1 - q_2\|$ для всех $(u_i, p_i) \in B_1, q_i \in R^m$ ($i = 1, 2$).

3. для некоторого допустимого $\delta > 0$ функция $f(x, t, u, p, q)$ непрерывна в области $Q_\delta \times B_1 \times R^m$, дифференцируема по переменным u, p, q при всех $(x, t) \in Q_\delta$, имеет первые обобщенные производные f_{x_i} $i = 1, \dots, n$ при всех $(u, p, q) \in B_1 \times R^m$; $f_{x_i}, f_{u_i}, f_{p_{ij}}, f_{q_k} \in C(B_1 \times R^m; L_p(Q_\delta))$ и найдутся функции $\Phi_3 \in L_p(Q_\delta), \Phi_4, \Phi_5 \in L_\infty(0, T; L_p(G_\delta))$ такие, что каждая из вектор-функций $f_{x_i}, f_{u_i}, f_{p_{ij}}, f_{q_k}$ ($i = 1, \dots, h, j = 1, \dots, n, k = 1, \dots, m$) удовлетворяет условию Липшица в следующем смысле: если $g(x, t, u, p, q)$ одна из этих функций, то

$$|g(x, t, u_1, p_1, q_1) - g(x, t, u_2, p_2, q_2)| \leq (|\Phi_3| + (|q_1| + |q_2|)|\Phi_4|)(|u_1 - u_2| + |p_1 - p_2|) + |\Phi_5| \|q_1 - q_2\|.$$

Построим вспомогательную функцию Φ , которая есть решение задачи

$$L\Phi = f(x, t, u_0, \nabla u_0, 0) \quad ((x, t) \in Q), \quad \Phi|_{t=0} = u_0(x), \quad B\Phi|_S = g, \quad (11)$$

такое, что $\Phi \in W_p^{2,1}(Q), \varphi\Phi_t \in L_p(0, T; W_p^s(G_\delta)), \varphi\Phi \in L_p(0, T; W_p^{2+s}(G_\delta))$. Условия на данные и условия 1–3 гарантируют, что $f(x, t, u_0, \nabla u_0, 0) \in L_p(Q), \varphi f(x, t, u_0, \nabla u_0, q_0) \in L_p(0, T; W_p^s(G_\delta))$ и поэтому теорема 1 применима. Ниже при доказательстве теоремы 3 мы фактически это покажем. По теореме Фубини, $\varphi\Phi_t \in W_p^s(G_\delta; L_p(0, T))$ и, таким образом, $\varphi\Phi_t \in C^{s-n/p}(\overline{G_\delta}; L_p(0, T))$ (см. соотношения (3.1)–(3.3) в [16]). В частности, $\Phi(x_j, t) \in W_p^1(0, T)$. Пусть u решение задачи (1)–(3), тогда функция $w = u - \Phi$ есть решение задачи

$$Lw = f(x, t, w + \Phi, \nabla(w + \Phi), \vec{q}) - f(x, t, u_0, \nabla u_0, 0) = F(x, w, \vec{q}), \quad w|_{t=0} = 0, \quad Bw|_S = 0, \quad (12)$$

$$w(x_j, t) = \tilde{\psi}_j(t) = \psi_j(t) - \Phi(x_j, t) \in W_p^1(0, T), \quad j = 1, 2, \dots, r. \quad (13)$$

Таким образом, мы свели задачу к эквивалентной задаче с однородными условиями.

Рассмотрим систему уравнений

$$f(x_j, t, u_0(x_j), \nabla u_0(x_j), \vec{q}(t)) - f(x_j, t, u_0(x_j), \nabla u_0(x_j), 0) = g_{0j}, \quad g_{0j} = \psi_{jt} - \Phi_t(x_j, t), \quad j = 1, 2, \dots, r,$$

которую также можно записать в виде

$$F(\vec{q}) = \vec{g}_0, \quad \vec{g}_0 = (g_{01}, \dots, g_{0r}) \quad (14)$$

Фиксируем $R_2 = 2 \| \vec{g}_0 \|_{L_p(0, T)}$. Запишем условие корректности.

4. Система $F(\vec{q}) = \vec{g}, \vec{g} = (g_1, \dots, g_r)$ имеет единственное решение \vec{q} для всех $\vec{g} \in L_p(0, T)$ таких, что $\vec{g} \in B_2 = \{ \vec{g} : \| \vec{g} - \vec{g}_0 \|_{L_p(0, T)} \leq R_2 \}$ и обратное отображение $\vec{q} = F^{-1}(\vec{g}), F^{-1} : B_2 \rightarrow L_p(0, T)$ удовлетворяет условию Липшица в B_2 .

Теорема 2. Предположим, что условия (4)–(8), 1–4 выполнены для некоторого допустимого $\delta > 0, 1 \geq s > n/p$ и функция φ обладает свойствами, указанными перед теоремой 1. Пусть кроме того выполнены условия согласования $\psi_j(0) = u_0(x_j)$ ($j = 1, 2, \dots, r$). Тогда найдется промежуток $[0, \tau_0]$, на котором существует единственное решение $(u, q_1, q_2, \dots, q_m)$ обратной задачи (1)–(3) такое, что $u \in W_p^{2,1}(Q^{\tau_0}), q_i(t) \in L_p(0, \tau_0), i = 1, \dots, m$. Кроме того, $\varphi u \in L_p(0, T; W_p^{2+s}(G_\delta)), \varphi u_t \in L_p(0, T; W_p^s(G_\delta))$.

Доказательство. Основной метод доказательства – теорема о неподвижной точке. Положим $\vec{q}_0 = F^{-1} \vec{g}_0, R_3 = 2 \| \vec{q}_0 \|_{L_p(0, T)}$. Зафиксируем $\tau \leq T$ и вектор $\vec{q} \in B_3 = \{ \vec{q} \in L_p(0, \tau) : \| \vec{q} \|_{L_p(0, \tau)} \leq R_3 \}$. Разрешимость задачи (12) при фиксированном \vec{q} вытекает из стандартных теорем о разрешимости нелинейных параболических уравнений. Схема рассуждений следующая. Используя теорему 1, сведем задачу (12) к уравнению вида

$$w = L^{-1}(f(x, t, w + \Phi, \nabla(w + \Phi), \bar{q}) - f(x, t, u_0, \nabla u_0, 0)) = L^{-1}(F(x, w, \bar{q})). \quad (15)$$

По определению пространство H_p^τ состоит из функций $w \in W_p^{2,1}(Q^\tau)$, удовлетворяющих однородным краевым и начальным условиям в (12), и таких, что $\varphi w_t \in L_p(0, \tau; W_p^s(G_\delta))$, $\varphi w \in L_p(0, \tau; W_p^{2+s}(G_\delta))$. Рассмотрим вспомогательную задачу

$$Lw_0 = f(x, t, u_0, \nabla u_0, \bar{q}) - f(x, t, u_0, \nabla u_0, 0) = F_0, w_0|_{t=0} = 0, Bw_0|_S = 0, \bar{q} \in B_3. \quad (16)$$

В силу наших условий на данные и теорем вложения $u_0 \in C^{2-(n+2)/p}(\bar{G})$, $\varphi u_0 \in C^{2+s-(n+2)/p}(\bar{G}_\delta)$. Легко проверить, используя условия 1–4, что $F_0 \in L_p(Q)$, $\varphi F_0 \in L_p(0, T; W_p^s(G_\delta))$ и более того справедлива оценка

$$\|F_0\|_{L_p(Q^\tau)} + \|\varphi F_0\|_{L_p(0, \tau; W_p^s(G_\delta))} \leq c(R_3).$$

Тогда в силу теоремы 1 решение w_0 задачи (16) допускает оценку

$$\|w_0\|_{H_p^\tau} = \|w_0\|_{W_p^{2,1}(Q^\tau)} + \|\varphi w_{0t}\|_{L_p(0, \tau; W_p^s(G_\delta))} + \|\varphi w_0\|_{L_p(0, \tau; W_p^{2+s}(G_\delta))} \leq c_1(R_3). \quad (17)$$

Возьмем в качестве параметра R_4 величину $2c_1(R_3)$ (без ограничения общности считаем, что эта постоянная не зависит от $\tau \leq T$). Ищем решение w в шаре $B_4 = \{w \in H_p^\tau : \|w\|_{H_p^\tau} \leq R_4\}$. Имеем, используя теоремы вложения, что при $\alpha < 1 - (n+2)/2p$

$$\|w + \Phi - u_0\|_{C(\bar{Q}^\tau)} \leq \tau^\alpha \sup_{\substack{t_1 \neq t_2, \\ x \in G}} \frac{|(w + \Phi)(x, t_1) - (w + \Phi)(x, t_2)|}{|t_1 - t_2|^\alpha} \leq c\tau^\alpha (\|w\|_{W_p^{2,1}(Q^\tau)} + \|\Phi\|_{W_p^{2,1}(Q)}) = c(R_4)\tau^\alpha.$$

Аналогично (при $\alpha < 1/2 - (n+2)/2p$)

$$\|\nabla(w + \Phi - u_0)\|_{C(\bar{Q}^\tau)} \leq \tau^\alpha \sup_{\substack{t_1 \neq t_2, \\ x \in G}} \frac{|\nabla((w + \Phi)(x, t_1) - (w + \Phi)(x, t_2))|}{|t_1 - t_2|^\alpha} \leq \tau^\alpha (\|w\|_{W_p^{2,1}(Q^\tau)} + \|\Phi\|_{W_p^{2,1}(Q)}) = c_1(R_4)\tau^\alpha.$$

Из этих двух неравенств вытекает, что найдется $\tau_1 \leq T$ такое, что при $\tau \leq \tau_1$ выполнено, что $c(R_4)\tau^\alpha \leq R_1/4$, $c_1(R_4)\tau^\alpha \leq R_1/4$ и значит при $w \in B_4$ будет выполнено, что

$$\|w + \Phi\|_{C(\bar{Q}^\tau)} + \|\nabla(w + \Phi)\|_{C(\bar{Q}^\tau)} \leq R_1. \quad (18)$$

Далее, нетрудно показать, что найдется параметр $\tau_2 \leq T$ такой, что для любой $\bar{q} \in B_3$ и $\tau \leq \tau_2$ уравнение (15) имеет решение в шаре B_4 , причем построенное отображение $\bar{q} \rightarrow w(\bar{q})$ удовлетворяет условию Липшица. Чтобы получить утверждение, мы показываем, что отображение $L^{-1}(F(x, w, \bar{q}))$ переводит шар B_4 в себя и является в нем сжимающим. Покажем, например, сжимаемость. Рассмотрим наиболее сложный случай $s < 1$. В силу теоремы 1

$$\|L^{-1}(F(x, w_1, \bar{q}) - F(x, w_2, \bar{q}))\|_{H_p^\tau} \leq c(\|F(x, w_1, \bar{q}) - F(x, w_2, \bar{q})\|_{L_p(Q^\tau)} + \|\varphi(F(x, w_1, \bar{q}) - F(x, w_2, \bar{q}))\|_{L_p(0, \tau; W_p^s(G_\delta))}).$$

Первое слагаемое оценивается с использованием 1–4 и теорем вложения через

$$(c_1 + c_2 R_2) \|w_1 - w_2\|_{C^1(\bar{Q}^\tau)} \leq c(R_3, R_4)\tau^\gamma \|w_1 - w_2\|_{W_p^{2,1}(Q^\tau)},$$

для некоторого $\gamma < 1/2 - (n+2)/2q$. Пусть $\Delta_h v = v(x+h) - v(x)$. Чтобы оценить второе слагаемое, используем ($k=1, 2$) представления

$$\Delta_h \varphi(F(w_k, \bar{q})) =$$

$$\int_0^1 \frac{\partial}{\partial \eta} \varphi(x + \eta h) f(x + \eta h, (w_k + \Phi)(x) + \eta \Delta_h(w_k + \Phi), \nabla((w_k + \Phi)(x) + \eta \Delta_h(w_k + \Phi)), \bar{q}) d\eta =$$

$$\int_0^1 \sum_{i=1}^n \varphi_{x_i}(x + \eta h) f(x + \eta h, (w_k + \Phi)(x) + \eta \Delta_h(w_k + \Phi), \nabla((w_k + \Phi)(x) + \eta \Delta_h(w_k + \Phi)), \bar{q}) +$$

$$+ \sum_{i=1}^n \varphi(x + \eta h) [f_{x_i}(x + \eta h, (w_k + \Phi)(x) + \eta \Delta_h(w_k + \Phi), \nabla((w_k + \Phi)(x) + \eta \Delta_h(w_k + \Phi)), \bar{q}) +$$

$$+ f_{u_i}(x + \eta h, (w_k + \Phi)(x) + \eta \Delta_h(w_k + \Phi), \nabla((w_k + \Phi)(x) + \eta \Delta_h(w_k + \Phi)), \bar{q}) \Delta_h(w_k + \Phi) +$$

$$+ \sum_{i=1}^n f_{p_i}(x + \eta h, (w_k + \Phi)(x) + \eta \Delta_h(w_k + \Phi), \nabla((w_k + \Phi)(x) + \eta \Delta_h(w_k + \Phi)) \Delta_h(w_{kx_i} + \Phi_{x_i})] d\eta$$

и следующую эквивалентную норму в пространстве $W_p^s(B_\delta(x_j))$ (см. [13]):

$$\|v\|_{W_p^s(B_\delta(x_j))}^p = \int_{B_{\delta_0}(0)} \frac{1}{|h|^{n+sp}} \int_{B_{j,h}} |\Delta_h v|^p dx dh, \quad \Delta_h v = v(x+h) - v(x),$$

где $B_{j,h} = \{x \in B_j : x+h \in B_\delta(x_j)\}$ и $\delta_0 = (\delta - \delta_2)/2$. Берем $h < \delta_0$. Далее мы должны вычесть эти представления при $k=1, k=2$ и учесть условия 1–4 и теоремы вложения при оценке интегралов. Пусть $w(\bar{q})$ – решение задачи (12) при некотором $\bar{q} \in B_3$. Полагая $x = x_j$ в (12), получим

$$\tilde{\psi}_{jt} + Aw(x_j, t) = f(x_j, t, (w + \Phi)(x_j), \nabla(w + \Phi)(x_j), \bar{q}) - f(x_j, t, u_0(x_j), \nabla u_0(x_j), 0), \quad j \leq r. \quad (19)$$

Это уравнение можно переписать в виде

$$f(x_j, t, u_0(x_j), \nabla u_0(x_j), \bar{q}) - f(x_j, t, u_0(x_j), \nabla u_0(x_j), 0) = \tilde{\psi}_{jt} +$$

$$f(x_j, t, u_0(x_j), \nabla u_0(x_j), \bar{q}) - f(x_j, t, (w + \Phi)(x_j), \nabla(w + \Phi)(x_j), \bar{q}) + Aw(x_j, t) = g_j(t)$$

и воспользоваться условием 4. Используя условие 4, сведем задачу к уравнению

$$\bar{q} = F^{-1}(\bar{g}(\bar{q})), \quad \bar{g} = (g_1, g_2, \dots, g_r).$$

Используя 4 и условия на данные легко показать, что оператор $F^{-1}(\bar{g}(\bar{q}))$ переводит шар B_3 в себя и является в нем сжимающим, если параметр τ достаточно мал. Покажем, что условия переопределения (13) выполнены. Полагая $x = x_j$ в (12), мы получим систему

$$w_t(x_j, t) + Aw(x_j, t) = f(x_j, t, (w + \Phi)(x_j), \nabla(w + \Phi)(x_j), \bar{q}) - f(x_j, t, u_0(x_j), \nabla u_0(x_j), 0), \quad j \leq r.$$

Вычитая (19) из этого равенства, получим $w_t(x_j, t) - \tilde{\psi}_{jt} = 0$. Интегрируя это равенство по t и учитывая условия согласования, получим $w(x_j, t) = \tilde{\psi}_j$ для всех $j = 1, 2, \dots, r$. Ч.т.д.

Пример. Рассмотрим линейную задачу об определении правой части:

$$f(x, t, u, \nabla u, \bar{q}) = \sum_{i=1}^n a_i u_{x_i} + a_0 u + \sum_{i=1}^m b_i(x, t) q_i.$$

Приведем условия на данные, гарантирующие выполнение условий 1–4.

Условия 1–3 сводятся к условиям

$$a_k \in L_p(Q) \cap L_p(0, T; W_p^1(G_\delta)), \quad b_i \in L_\infty(0, T; L_p(G)) \cap L_\infty(0, T; W_p^1(G_\delta)) \quad (20)$$

для некоторого допустимого параметра $\delta > 0$, где $k = 0, 1, \dots, n, i = 1, 2, \dots, m$. Построим матрицу $B(t)$ размерности $m \times m$ ($m = rr_0$) строки которой с номерами от $(j-1)r_0 + 1$ до jr_0 заняты столбцами $(b_1(x_j, t), b_2(x_j, t), \dots, b_m(x_j, t))$. Тогда условие 4 выполнено, если найдется $\delta > 0$ такое, что

$$|\det B(t)| \geq \delta_0 \text{ п.в. на } (0, T). \quad (21)$$

Авторы поддержаны РФФИ и правительством ХМАО-ЮГРЫ (Грант 15-41-00063, p_урал_a).

Литература

1. Marchuk, G.I. Mathematical Models in Environmental Problems / G.I. Marchuk // Studies in Mathematics and its Applications. – 1986. – Vol. 16. – P. 5–6.
2. Прилепко, А.И. Теоремы разрешимости и метод Ротэ в обратных задачах для уравнения параболического типа. I / А.И. Прилепко, В.В. Соловьев // Дифференциальные уравнения. – 1987. – Т. 23, № 10. – С. 1791–1799.

3. Afinogenova, O.A. Stabilization of the solution to the identification problem of the source function for a one-dimensional parabolic equation / O.A. Afinogenova, Yu.Ya. Belov, I.V. Frolenkov // *Doklady Mathematics*. – 2009. – Vol. 79, Issue 1. – P. 70–72.
4. Белов, Ю.Я. О задаче идентификации функции источника для уравнения типа Бюргерса / Ю.Я. Белов, К.В. Коршун // *Журнал Сибирского федерального университета. Серия «Математика и физика»*. – 2012. – Т. 5, № 4. – С. 497–506.
5. Кулиев, М.А. Многомерная обратная задача для параболического уравнения в ограниченной области / М.А. Кулиев // *Нелинейные граничные задачи*. – 2004. – В. 14. – С. 138–145.
6. Прилепко, А.И. О разрешимости обратных краевых задач определения коэффициента перед младшей производной в параболическом уравнении / А.И. Прилепко, В.В. Соловьев // *Дифференц. уравнения*. – 1987. – Т. 23, № 1. – С. 136–143.
7. Guidetti, D. Asymptotic expansion of solutions to an inverse problem of parabolic type / D. Guidetti // *Advances in Difference Equations*. – 2008. – Vol. 13, № 5-6. – P. 399–426.
8. Guidetti, D. Convergence to a stationary state of solutions to inverse problems of parabolic type / D. Guidetti // *Discrete and continuous dynamical systems. Series S*. – 2013. – Vol. 6, Issue 3. – P. 711–722.
9. Prilepko, A. I. Methods for solving inverse problems in Mathematical Physics / A.I. Prilepko, D.G. Orlovsky, I.A. Vasin. – New-York: Marcel Dekker, Inc, 1999. – 709 с.
10. Пятков, С. Г. О некоторых классах коэффициентных обратных задач для параболических систем уравнений / С.Г. Пятков, М.Л. Самков // *Математические труды*. – 2012. – Т. 15, № 1. – С. 155–177.
11. Ozisik, M.N. Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications / M.N. Ozisik, H.R.B. Orlande. – New York: Taylor & Francis. – 2000. – 314 p.
12. Mamonov, A. V. Point source identification in nonlinear advection-diffusion-reaction systems / A.V. Mamonov, Y-H. R. Tsai // *Inverse Problems*. – 2013. – Vol. 29, no. 3. – p. 035009.
13. Трибель, Х. Теория интерполяции. Функциональные пространства. Дифференциальные операторы / Х. Трибель. – М.: Мир, 1980. – 664 с.
14. Denk, R. Optimal L^p - L^q -estimates for parabolic boundary value problems with inhomogeneous data / R. Denk, M. Hieber, J. Prüss // *Math. Z.* – 2007. – Vol. 257, Issue 1. – P. 193–224.
15. Ладыженская, О.А. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа / О.А. Ладыженская, В.А. Солонников, Н.Н. Уралцева. – М.: Наука. – 1967. – 736 с.
16. Amann, H. Compact embeddings of vector-valued Sobolev and Besov spaces / H. Amann // *Glasnik matematički*. – 2000. – III. Ser. 35, no.1. – P. 161–177.

Поступила в редакцию 21 сентября 2017 г.

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2017, vol. 9, no. 4, pp. 19–26

DOI: 10.14529/mmph170403

ON THE SOURCE FUNCTION RECOVERING IN QUAZILINEAR PARABOLIC PROBLEMS WITH POINTWISE OVERDETERMINATION CONDITIONS

S.G. Pyatkov, V.V. Rotko

Yugra State University, Khanty-Mansyisk, Russian Federation
E-mail: s_pyatkov@ugrasu.ru

In the article we examine the question of well-posedness in the Sobolev spaces of the inverse source problem in the case of a quasilinear parabolic system of the second order. These problems arise when describing heat and mass transfer, diffusion, filtration, and in many other fields. The main part of the operator is linear. The unknown functions depending on time occur in the nonlinear right-hand side. In particular, this class of problems includes the coefficient inverse problems on determination of the lower order coefficients in a parabolic equation or a system. The overdetermination conditions are the values of the solution at some collection of points lying inside the spacial domain. The Dirichlet and oblique derivative problems are taken as boundary conditions. The problems are studied in a bounded domain

with a smooth boundary. However, the results can be generalized to the case of unbounded domains as well for which the corresponding solvability theorems hold. The conditions ensuring local in time well-posedness of the problem in the Sobolev classes are exposed. The conditions on the data are minimal. The results are sharp. The problem is reduced to an operator equation whose solvability is proven with the use of a priori bounds and the fixed point theorem. The solution possesses all generalized derivatives occurring in the system which belong to the space L_p with $p > n + 2$ and some additional necessary smoothness in some neighborhood about the overdetermination points.

Keywords: parabolic equation; inverse problem; heat-and-mass transfer; boundary value problem; source function.

References

1. Marchuk G.I. Mathematical Models in Environmental Problems. Studies in Mathematics and its Applications. *Studies in Mathematics and its Applications*, 1986, Vol. 16, pp. 5–6. DOI: 10.1016/S0168-2024(08)70234-0
2. Prilepko A.I., Solov'ev V.V. Solvability theorems and the Rothe method in inverse problems for an equation of parabolic type. I. *Differ. Uravn.*, 1987, Vol. 23, no. 10, pp. 1791–1799. (in Russ.).
3. Afinogenova O.A., Belov Yu.Ya., Frolenkov I.V. Stabilization of the solution to the identification problem of the source function for a one-dimensional parabolic equation. *Doklady Mathematics*, 2009, Vol. 79, Issue 1, pp. 70–72. DOI: 10.1134/S1064562409010207
4. Belov Yu.Ya., Kirshun K.V. On recovering the source function for the Burgers-type equation. *Journal of Siberian Federal University. Mathematics & Physics*, 2012, Vol. 5, no. 4, pp. 497–506. (in Russ.).
5. Kuliev M.A. Mnogomernaya obratnaya zadacha dlya parabolicheskogo uravneniya v ograničennoy oblasti (A multidimensional inverse problem for a parabolic equation in a bounded domain). *Nelineynye granichnye zadachi*, 2004, Vol. 14, pp. 138–145. (in Russ.).
6. Prilepko A.I., Solov'ev V.V. Solvability of the inverse boundary-value problem of finding a coefficient of a lower-order derivative in a parabolic equation. *Differ. Equations*, 1987, V. 23, no.1, pp. 101–107.
7. Guidetti D. Asymptotic expansion of solutions to an inverse problem of parabolic type. *Advances in Difference Equations*, 2008, Vol. 13, no. 5-6, pp. 399–426.
8. Guidetti D. Convergence to a stationary state of solutions to inverse problems of parabolic type. *Discrete and continuous dynamical systems. Series S*, 2013, Vol. 6, Issue 3, pp. 711–722. DOI:10.3934/dcdss.2013.6.711
9. Prilepko A.I., Orlovsky D.G., Vasin I.A. Methods for solving inverse problems in Mathematical Physics, New-York: Marcel Dekker, Inc, 1999, 709 p.
10. Pyatkov S.G., Samkov M.L. On some classes of coefficient inverse problems for parabolic systems of equations. *Siberian Advances in Mathematics*, 2012, Vol. 22, Issue 4, pp. 287–302. DOI: 10.3103/S1055134412040050
11. Ozisik M.N., Orlande H.R.B. *Inverse Heat Transfer: Fundamentals and Applications*, New York: Taylor & Francis, 2000, 314 p.
12. Mamonov A.V., Tsai Y-H.R. Point source identification in nonlinear advection-diffusion-reaction systems. *Inverse Problems*, 2013, Vol. 29, no. 3, p. 035009. DOI: 10.1088/0266-5611/29/3/035009
13. Triebel H. *Interpolation Theory, Function Spaces, Differential Operators*. Berlin, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften 1978, 528 p.
14. Denk R., Hieber M., Prüss J. Optimal L^p - L^q -estimates for parabolic boundary value problems with inhomogeneous data. *Math. Z.*, 2007, Vol. 257, Issue 1, pp. 193–224. DOI 10.1007/s00209-007-0120-9
15. Ladyženskaja O.A., Solonnikov V.A., Ural'ceva N.N. *Linear and quasi-linear equations of parabolic type. Translations of Mathematical Monographs*. Providence, RI: American Mathematical Society, 1968, Vol. 23, 648 p.
16. Amann H. Compact embeddings of vector-valued Sobolev and Besov spaces. *Glasnik matemicki*, 2000, III. Ser. 35, no.1, pp. 161–177.

Received September 21, 2017

SOBOLEV TYPE MATHEMATICAL MODELS WITH RELATIVELY POSITIVE OPERATORS IN THE SEQUENCE SPACES

N.N. Solovyova, S.A. Zagrebina, G.A. Sviridyuk

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: zargebinasa@susu.ru

In the sequence spaces which are analogues of Sobolev function spaces we consider mathematical model whose prototypes are Barenblatt – Zheltov – Kochina equation and Hoff equation. One should mention that these equations are degenerate equations or Sobolev type equations. Nonexistence and nonuniqueness of the solutions is the peculiar feature of such equations. Therefore, to find the conditions for positive solution of the equations is a topical research direction. The paper highlights the conditions sufficient for positive solutions in the given mathematical model. The foundation of our research is the theory of the positive semigroups of operators and the theory of degenerate holomorphic groups of operators. As a result of merging of these theories a new theory of degenerate positive holomorphic groups of operators has been obtained. The authors believe that the results of a new theory will find their application in economic and engineering problems.

Keywords: Sobolev sequence spaces; Sobolev type models; degenerate positive holomorphic groups of operators.

Introduction

The Barenblatt–Zheltov–Kochina equation [1]

$$(\lambda - \Delta)u_t = \alpha \Delta u + f \quad (1)$$

simulates the pressure dynamics of the fluid filtered in fractured porous media. Besides, the equation (1) simulates processes of moisture transfer in a soils [2] and processes of the solid-to-fluid thermal conductivity in the environment with two temperatures [3]. Note that the required function $u = u(x, t)$ must be nonnegative, that is $u \geq 0$ by physical necessity. The Hoff equation [4]

$$(\lambda + \Delta)u_t = \alpha u + f \quad (2)$$

simulates the H-beam buckling under the influence of high temperatures. The case is also most interesting when the required function $u = u(x, t)$ is nonnegative.

Consider both equations as special cases of Sobolev type mathematical model such as

$$Lu_t = Mu + f, \quad (3)$$

given in Sobolev sequence spaces

$$l_q^m = \left(u = \{u_k\} : \sum_{k=0}^{\infty} \lambda_k^{\frac{mq}{2}} |u_k|^q < \infty \right), m \in \mathbb{R}, q \in [1, +\infty).$$

Here $L = L(\Lambda)$ and $M = M(\Lambda)$ is polynomials with real coefficients, and their degrees satisfy the relation

$$\deg L \geq \deg M; \quad (4)$$

Λ is transfer of the Laplace operator Δ to spaces l_q^m , a $\{\lambda_k : \lambda_k \in \mathbb{R}_+\}$ is monotonically increasing sequence such as $\lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_k = +\infty$.

The peculiarities of our approach will be, firstly, the active use of the theory of bounded operators and the degenerate holomorphic groups of operators generated by them [5, ch. 3]. Secondly, we apply the theory of positive groups of operators, defined on Banach lattices [6, ch. 2 and 3], to lay the foundations of the theory of positive degenerate holomorphic groups of operators whose phase spaces are Banach lattices. Thirdly, we consider the concrete mathematical model (3) in Sobolev sequence spaces l_q^m , $m \in \mathbb{R}$, $q \in [1, +\infty)$, which can be interpreted as the space of Fourier coefficients of solutions

of initial-boundary value problems for equations of the form (1) or (2). Let us note the difference between our approach and the ideas and methods proposed in [7].

The foundations of the theory of degenerate positive groups of operators theory are laid in the first part of the article, which are generated by relatively positively bounded operators. The degenerate positive holomorphic groups of operators obtained are applied to the study of the Cauchy problem solvability for the homogeneous (that is $f(t) \equiv 0$) abstract equation (3). The initial value is taken from the phase space of such an equation. In the second part, the solvability of the Showalter–Sidorov problem [8] for the abstract nonhomogeneous equation (3) was studied. Sufficient conditions are obtained for the existence of a positive solution of this problem. Abstract results are applied to a mathematical model of the form (3), where $L = L(\Lambda)$ and $M = M(\Lambda)$ are polynomials with real coefficients. It is noted that the Barenblatt–Zhel'tov–Kochina equation for $\lambda\alpha \in \mathbb{R}_+$ satisfies the sufficient conditions found, and therefore the initial-boundary value problem can have non-negative solutions. The final part of the article outlines directions for further possible research. The list of literature does not pretend to be complete and reflects only the tastes and preferences of the authors.

1. Degenerate positive holomorphic groups of operators

Let \mathcal{U} and \mathcal{F} be Banach spaces, operators $L \in \mathcal{L}(\mathcal{U}; \mathcal{F})$ (i.e. linear and continuous), $M \in Cl(\mathcal{U}; \mathcal{F})$ (i.e. linear, closed and densely defined). Sets $\rho^L(M) = \{\mu \in \mathbb{C} : (\mu L - M)^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{F}; \mathcal{U})\}$ and $\sigma^L(M) = \mathbb{C} \setminus \rho^L(M)$ are called *resolvent set* and *L-spectrum of operator M* respectively. Operator M is (L, σ) -bounded if

$$\exists a \in \mathbb{R}_+ \forall \mu \in \mathbb{C} \quad (|\mu| > a) \Rightarrow (\mu \in \rho^L(M)).$$

If operator M is $(L, 0)$ -bounded, then operators P, Q are the projectors

$$P = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} R_{\mu}^L(M) d\mu \in \mathcal{L}(\mathcal{U}), \quad Q = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} L_{\mu}^L(M) d\mu \in \mathcal{L}(\mathcal{F}).$$

Here $R_{\mu}^L(M) = (\mu L - M)^{-1} L$ is called a *right resolvent*, and $L_{\mu}^L(M) = L(\mu L - M)^{-1}$ is called a *left resolvent of operator M*; contour $\gamma = \{\mu \in \mathbb{C} : |\mu| = r > a\}$. Here and below, loop integrals are understood in the sense of Riemann. We consider subspaces $\mathcal{U}^0 = \ker P$, $\mathcal{U}^1 = \text{im } P$, $\mathcal{F}^0 = \ker Q$, $\mathcal{F}^1 = \text{im } Q$; and denote operator of the contraction $L(M)$ on \mathcal{U}^k ($\mathcal{U}^k \cap \text{dom } M$) by $L_k(M_k)$, $k = 0, 1$.

Theorem 1.1. *Let operator M be (L, σ) -bounded. Then*

- (i) operators $L_k \in \mathcal{L}(\mathcal{U}^k; \mathcal{F}^k)$, $k = 0, 1$; and there exist the operator $L_1^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{F}^1; \mathcal{U}^1)$;
- (ii) operators $M_k \in Cl(\mathcal{U}^k; \mathcal{F}^k)$, $k = 0, 1$; and there exist the operator $M_0^{-1} \in \mathcal{L}(\mathcal{F}^0; \mathcal{U}^0)$.

Let operator M be (L, σ) -bounded, construct the operator $H = M_0^{-1} L_0 \in \mathcal{L}(\mathcal{U}^0)$. Operator M is called (L, p) -bounded, $p \in \mathbb{N}$, ($(L, 0)$ -bounded) if $H^p \neq \mathcal{O}$, and $H^{p+1} = \mathcal{O}$ ($H = \mathcal{O}$). Let operator M be (L, p) -bounded, $p \in \{0\} \cup \mathbb{N}$, we consider the equation

$$L\dot{u} = Mu. \tag{5}$$

Vector function $u = u(t)$, $t \in \mathbb{R}$, is *solution of equation (5)* if it satisfies this equation. Decision $u = u(t)$ is called *solution of the Cauchy problem*

$$u(0) = u_0, \tag{6}$$

if it satisfies condition (6) at some $u_0 \in \mathcal{U}$. The set $\mathcal{P} \subset \mathcal{U}$ is *phase space* of equation (5) if its any solution $u(t) \in \mathcal{P}$ at each $t \in \mathbb{R}$; and for any $u_0 \in \mathcal{P}$ there exists a unique solution $u \in C^1(\mathbb{R}; \mathcal{U})$ of problem (6) for equation (5). Finally, we introduce a degenerate (if $\ker L \neq \{0\}$) holomorphic (in the whole plane \mathbb{C}) group of operators

$$U^t = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} R_{\mu}^L(M) e^{\mu t} d\mu, t \in \mathbb{C}.$$

notice, that $\mathcal{U}^0 = P$, where $\ker P \supset \ker L$.

Theorem 1.2. Let operator M be (L, p) -bounded, $p \in \{0\} \cup \mathbb{N}$. Then

- (i) any solution $u \in C^1(\mathbb{R}; \mathcal{U})$ of equation (5) has the form $u(t) = U^t u_0$, $t \in \mathbb{R}$, and some $u_0 \in \mathcal{U}$;
- (ii) the phase space of equation (5) is subspace \mathcal{U}^1 .

Thus, under the conditions of the theorem 1.2 L -resolvent $(\mu L - M)^{-1}$ of operator M in the ring $|\mu| > a$ decomposes into a Laurent series

$$(\mu L - M)^{-1} = \sum_{k=1}^{\infty} \mu^{-k} S^{k-1} L_1^{-1} Q - \sum_{k=0}^p \mu^k H^k M_0^{-1} (I - Q),$$

where operators $S = L_1^{-1} M_1 \in \mathcal{L}(\mathcal{U}^1)$, $H = M_0^{-1} L_0 \in \mathcal{L}(\mathcal{U}^0)$. Hence the resolving degenerate group U^t of equation (5) is as follows

$$U^t = (I - Q) + e^{St} Q,$$

where

$$e^{St} = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} (\mu I - S) e^{\mu t} d\mu = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{St^k}{k!}$$

is the group of operators of equation (5), given on the phase space \mathcal{U}^1 .

Next, we give an order relation “ \geq ”, compatible with both vector and metric structures, to \mathcal{U}^1 . In other words, we assume that $(\mathcal{U}^1; \geq)$ is a Banach lattice. Recall those properties of Banach lattices, which will prove useful to us in the future. An arbitrary set X is called *ordered* if on $X \times X$ there is the *relation of order* \geq , which satisfies the following axioms:

- (io) $x \geq x$ for each $x \in X$;
- (iio) $(x \geq y) \wedge (y \geq x) \Rightarrow (x = y)$ for any $x, y \in X$;
- (iiio) $(x \geq y) \wedge (y \geq z) \Rightarrow (x \geq z)$ for any $x, y, z \in X$.

An ordered vector space X is called *Riesz space* if in addition, the following axioms are satisfied:

- (ivo) $(x \geq y) \Rightarrow (x + z \geq y + z)$ for all $x, y, z \in X$.
- (vo) $(x \geq y) \Rightarrow (\alpha x \geq \alpha y)$ for all $x, y \in X$ and each $\alpha \in \{0\} \cup \mathbb{R}_+$.

The *Riesz space* X is called *functional Riesz space* if $u \vee v, u \wedge v \in X$ for any $u, v \in X$. Here

$$(u \vee v)(x) = \max\{u(x), v(x)\}, (u \wedge v)(x) = \min\{u(x), v(x)\}.$$

The spaces $C(\Omega)$, $C(\overline{\Omega})$, where $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ is a domain, and spaces l_q , where $q \in [1, +\infty]$ are the classical functional Riesz spaces examples. In these examples $u \vee v, u \wedge v$ are defined pointwise, but if measure is given on Ω , and it is possible to define these elements almost everywhere, then the Lebesgue spaces $L_q(\Omega)$, $q \in [1, +\infty]$ can be assigned to the functional Riesz spaces.

In the Riesz function space, the following elements can be defined $u_+ = \max\{u, 0\}$, and $u_- = \min\{-u, 0\}$, so that $u = u_+ - u_-$, and there is another element $|u| = u_+ + u_-$. If norm $\|\cdot\|_X$ is given on the Riesz functional space X and satisfies the axiom

$$(vio) (|u| \geq |v|) \Rightarrow (\|u\|_X \geq \|v\|_X) \text{ for all } u, v \in X,$$

then we call the Riesz function space X *normed Riesz function space*. A complete normed functional space is called a Banach lattice. Spaces $C(\Omega)$, $C(\overline{\Omega})$ and $L_q(\Omega)$ with the qualifications specified above, as well as space l_q , where domain $\Omega \subset \mathbb{R}^n$, $q \in [1, +\infty]$ are examples of Banach lattices.

Further, let X is vector space. Convex set $C \subset X$ we call a cone if

- (ic) $C + C \subset C$;
- (iic) $\alpha C \subset C$ for any $\alpha \in \{0\} \cup \mathbb{R}_+$;
- (iiic) $C \cap (-C) = \{0\}$.

The cone C is called *generative* if

- (ivc) $C - C = X$.

Now let X is Riesz space. We construct the set

$$X_+ = \{x \in X: x \geq 0\}.$$

Proposal 1.1. Let X be a vector space, $C \subset X$ is generative cone. Then X is Riesz space, where relative \geq is given by

$$(x \geq y) \Leftrightarrow (x - y \in C).$$

Proposal 1.2. Let X be Riesz space, then X_+ is generative cone.

Let X be Banach lattice with generative cone X_+ . Linear bounded operator $A \in \mathcal{L}(X)$ is *positive* if $Au \geq 0$ for all $u \in X_+$. Holomorphic group of operators $X^* = \{X^t: X^t \in \mathcal{L}(X) \text{ for all } t \in \mathbb{R}\}$ is called *positive* if $X^t u \geq 0$ for all $u \in X_+$ and $t \in \mathbb{R}$.

Proposal 1.3. Holomorphic group X^* is called exactly positive when its generator is positive $A = \left(X^t\right)_{t=0}'$.

Finally, let us return to the abstract problem (5), (6). We will be interested in its *positive solution* $u = u(t)$, i.e. such that $u(t) \geq 0$ for all $t \in \mathbb{R}$. Therefore, we consider the phase space of equation (5) \mathcal{V}^1 Banach lattice, generated by a cone \mathcal{V}_+^1 . (L, p) -bounded operator M is *positive* (L, p) -bounded, $p \in \{0\} \cup \mathbb{N}$ if $Su \in \mathcal{V}_+^1$ for any $u \in \mathcal{V}_+^1$. The degenerate holomorphic group $U^* \in C^\infty(\mathbb{R}; \mathcal{L}(\mathcal{V}))$, generated (L, p) -by positive operator M is called *a degenerate positive holomorphic group*.

Theorem 1.3. Let operator M is positive (L, p) -bounded, $p \in \{0\} \cup \mathbb{N}$. Then for any $u_0 \in \mathcal{V}_+^1$ there is the unique positive solution $u = u(t)$, $t \in \mathbb{R}$, of problem (5), (6), and it has the form $u(t) = S^t u_0$.

2. Mathematical model in sequence spaces

Let \mathcal{U} и \mathcal{F} be Banach spaces, operators $L \in \mathcal{L}(\mathcal{U}; \mathcal{F})$, $M \in Cl(\mathcal{U}; \mathcal{F})$, and operator M is (L, p) -bounded, $p \in \{0\} \cup \mathbb{N}$. Consider a linear inhomogeneous equation of Sobolev type

$$L \dot{u} = Mu + f. \tag{7}$$

Vector function $u \in C([0, \tau]; \mathcal{U}) \cap C^1((0, \tau); \mathcal{U})$, $\tau \in \mathbb{R}_+$, is called *solution of equation (7)* if it satisfies this equation for some $f = f(t)$. The solution $u = u(t)$ of equation (7) is called *solution of the Showalter – Sidorov problem* [9]

$$\lim_{t \rightarrow 0+} P(u(t) - u_0) = 0, \tag{8}$$

if it also satisfies the initial condition (8). Here $P: \mathcal{U} \rightarrow \mathcal{U}^1$ along \mathcal{V}^0 is projector. Further, let \mathcal{U} be a Banach lattice generated by the cone \mathcal{U}_+ . The solution $u = u(t)$ of problem (7), (8) is *positive* if $u(t) \in \mathcal{U}_+$ for any $t \in [0, \tau)$.

We will be interested in the conditions under which the solution $u = u(t)$ of problem (7), (8) is positive. Let \mathcal{F} be also be a Banach lattice generated by a cone \mathcal{F}_+ . If operator M is (L, p) -bounded, $p \in \{0\} \cup \mathbb{N}$, then it is not difficult to show that the subspaces \mathcal{U}^k and \mathcal{F}^k , $k = 0, 1$, are also Banach lattices generated by cones $\mathcal{U}_+^k = \mathcal{U}^k \cap \mathcal{U}_+$ and $\mathcal{F}_+^k = \mathcal{F}^k \cap \mathcal{F}_+$, $k = 0, 1$, respectively. (L, p) -bounded operator M is called *strongly positive* if

(ip) operator $L_0 : \mathcal{U}_+^0 \rightarrow \mathcal{F}_+^0$, and operator $L_1 : \mathcal{U}_+^1 \rightarrow \mathcal{F}_+^1$ is a toplinear isomorphism;

(iip) operator $M_1 : \mathcal{U}_+^1 \cap \text{dom } M \rightarrow \mathcal{F}_+^1$ and operator $M_0 : \mathcal{U}_+^0 \cap \text{dom } M \rightarrow \mathcal{F}_+^0$, and $M_0^{-1}[\mathcal{F}_+^0] \subset \mathcal{U}_+^0$.

It is easy to see that *strongly positive* (L, p) -bounded operator M is *positive* (L, p) -bounded, $p \in \{0\} \cup \mathbb{N}$. Let be $f = (I - Q)f + Qf = f^0 + f^1$, where $Q : \mathcal{F} \rightarrow \mathcal{F}^1$ is projector along \mathcal{F}_0 .

Theorem 2.1. *Let \mathcal{U} be a Banach lattice and operator M is strongly positive (L, p) -bounded, $p \in \{0\} \cup \mathbb{N}$. Then for any vector functions $f : [0, \tau] \rightarrow \mathcal{F}$ such that $f^0 \in C^{p+1}((0, \tau); \mathcal{F}^0)$, $-f^{0(k)}(t) \in \mathcal{F}_+^0$, $k = \overline{0, p+1}$, $t \in (0, \tau)$, $f^1 \in C([0, \tau]; \mathcal{F}_+^1)$, and for any vector $u_0 \in \mathcal{U}$, such that $u_0^1 \in \mathcal{U}_+^1$ there exists the unique positive solution $u = u(t)$, which also has the form*

$$u(t) = -\sum_{k=0}^p H^k M_0^{-1} f^{0(k)}(t) + U^t u_0 + \int_0^t U^{t-\tau} L_1^{-1} f^1(\tau) d\tau.$$

Here $f^{0(k)}(t) = \frac{d^k}{dt^k} f^0(t)$, $k = \overline{0, p+1}$. Proof of the theorem 2.1 does not differ fundamentally from the proof of the theorem 5.1.1 [5]. We check the positivity of the resulting solution for the reader. We also note that condition $-f^{0(k)}(t) \in \mathcal{F}_+^0$, $t \in (0, \tau)$, $k = \overline{0, p+1}$, seems difficult, so here is an example: $f^0(t) = -e^{\alpha t} f_0$, where $\alpha \in \mathbb{R}_+$, $f_0 \in \mathcal{F}_+^0$.

We consider Sobolev sequence spaces l_q^m , $m \in \mathbb{R}$, $q \in [1, +\infty)$. First of all, we note that these spaces are Banach spaces with the norm

$$\|u\|_{m,q} = \left(\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{\frac{mq}{2}} |u_k|^q \right)^{\frac{1}{q}}.$$

Then pay attention to dense and continuous investments $l_q^m \hookrightarrow l_q^n$ at $m \geq n$. (The proof of this fact is left to the reader). Finally, we set operator $\Lambda u = (\lambda_k u_k)$, where $u = (u_k)$. We show that operator $\Lambda \in \mathcal{L}(l_q^{m+2}; l_q^m)$. Indeed,

$$\|\Lambda u\|_{m,q} = \left(\sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k^{\frac{mq}{2}+q} |u_k|^q \right)^{\frac{1}{q}} = \|u\|_{m+2,q}.$$

Let's construct operators $L = L(\Lambda)$ and $M = M(\Lambda)$, where $L(s)$ and $M(s)$ are polynomials with real (for simplicity) coefficients. If the condition (4) is satisfied, that operators $L, M \in \mathcal{L}(l_q^{m+\text{deg } L}; l_q^m)$, $m \in \mathbb{R}$, $q \in [1, +\infty)$. Indeed, $\|u\|_{m+\text{deg } L, q} \geq \|u\|_{m+\text{deg } M, q}$, $u \in l_q^{m+\text{deg } L}$, $m \in \mathbb{R}$, $q \in [1, +\infty)$. Hence, by the continuity of the embedding $l_q^{m+\text{deg } L} \hookrightarrow l_q^{m+\text{deg } M}$ follows the truth of what has been said.

Lemma 2.1. *Let*

(i) *the condition (4) is satisfied;*

(ii) *polynomials $L = L(s)$ and $M = M(s)$ have only real roots and have no common roots.*

Then operator M is $(L, 0)$ -bounded.

Before proceeding with the proof of this assertion, we make a number of remarks. At first, let operators $L, M \in \mathcal{L}(\mathcal{U}; \mathcal{F})$, where \mathcal{U} and \mathcal{F} are Banach spaces. If there exists a vector $\psi \in \mathcal{U}$ such that $M\psi = L\varphi$, where the vector $\varphi \in \ker L \setminus \{0\}$, then it is called the adjoint vector of operator L . Secondly, operator $A \in \mathcal{L}(\mathcal{U}; \mathcal{F})$ is called Fredholm operator, if $\dim \ker A = \text{codim im } A$. Third, the proof of Lemma 2.1 will be based on the following assertion, which is a particular case of Theorem 4.6.1 [5].

Proposal 2.1. Let be operators $L, M \in \mathcal{L}(\mathcal{U}; \mathcal{F})$, and operator L is Fredholm operator. Then the following statements are equivalent:

- (i) operator M is $(L, 0)$ -bounded;
- (ii) operator L does not have associated vectors.

We proceed to the proof of the lemma 2.1. Fredholmism of operator $L = L(\Lambda)$ is obvious. Let polynomial $L = L(s)$ has no real roots. Then $\ker L(\Lambda) = \{0\}$, means operator L does not have associated vectors. If polynomial $L = L(s)$ has real roots, then $\ker L(\Lambda) \neq \{0\}$ and finite-dimensional. If condition (ii) of the lemma 2.1 is satisfied, then $M(\Lambda)\varphi \notin \text{im} L(\Lambda)$ for all $\varphi \in \ker L(\Lambda) \setminus \{0\}$. Lemma 2.1 is proved.

We introduce in spaces $l_q^m, m \in \mathbb{R}, q \in [1, +\infty)$, Banach lattices. In each of them we choose a family of vectors $\{e_k\}$, all components of which are zero except for the component that is equal to unity. We construct the linear span of these families consisting of linear combinations of these vectors with positive coefficients. The closure of this linear shell in the norm of the space l_q^m we denote by C_q^m , $m \in \mathbb{R}, q \in [1, +\infty)$. As is easy to see, C_q^m is generating cone in space $l_q^m, m \in \mathbb{R}, q \in [1, +\infty)$.

Lemma 2.2. Let the conditions of the lemma 2.1 are satisfied, and all the coefficients of the polynomials $L(s)$ and $M(s)$ are positive. Then operator M is strongly positive $(L, 0)$ -bounded.

Proof. By the lemma 2.1 and theorem 1.1 space $l_q^{m+\text{deg} L}$ splits into a direct sum $l_{q,0}^{m+\text{deg} L} \oplus l_{q,1}^{m+\text{deg} L}$, and $l_{q,0}^{m+\text{deg} L} = \ker L(\Lambda)$. If $\ker L(\Lambda) = \{0\}$, then the assertion of Lemma 2.2 is obvious. Let $\ker L(\Lambda) \neq \{0\}$. This can happen only when one of the roots of the polynomial $L(s)$ coincides with a member of the sequence $\{\lambda_k\}$. By construction, the sequence $\{\lambda_k\}$ monotonically increases, and $\lim_{k \rightarrow \infty} \lambda_k = +\infty$. This, in particular, means that a set of equal terms of a sequence can not be infinite. Let $\lambda_j = \lambda_{j+1} = \dots = \lambda_{j+l} = \lambda$, where λ is the root of the polynomial $L(s)$. Hence $\ker L(\Lambda) = \text{span}\{e_j, e_{j+1}, \dots, e_{j+l}\}$.

Further, the space l_q^m also splits into a direct sum $l_{q,0}^m \oplus l_{q,1}^m$, and $l_{q,0}^m = M(\Lambda)[\ker L(\Lambda)] = \text{span}\{e_j, e_{j+1}, \dots, e_{j+l}\}$, a $l_{q,1}^m = \text{im} L(\Lambda)$, i.e. $l_{q,1}^m$ there is a closure in the norm $l_{q,1}^m$ span of vectors $\{e_k : \lambda_k \neq \lambda\}$.

Hence, $l_{q,1}^{m+\text{deg} L}$ there is a closure $\text{span}\{e_k : \lambda_k \neq \lambda\}$ in norm $l_{q,1}^{m+\text{deg} L}$. Strongly positive $(L, 0)$ -limitation of operator M follows from the positivity of the coefficients of the polynomials $L(s)$ and $M(s)$.

By Lemmas 2.1, 2.2 and Theorem 2.1, we have

Theorem 2.2. Let the conditions of Lemmas 2.1 and 2.2. Then for any vector function $f = f(t)$ such that $f^0 \in C^1((0, \tau); l_{q,0}^{m+\text{deg} L})$ and $-f^0(t) \in C_q^{m+\text{deg} L} \cap l_{q,0}^{m+\text{deg} L}; t \in (0, \tau)$, and $f_1 \in C([0, \tau]; C_q^{m+\text{deg} L} \cap l_{q,1}^{m+\text{deg} L})$ and any vector $u_0 \in C_q^{m+\text{deg} L}$, such that $u_0^1 \in C_q^{m+\text{deg} L} \cap l_{q,1}^{m+\text{deg} L}$, there exists a unique positive solution of the problem (7), (8) $u = u(t)$, which also has the following form

$$u(t) = -M_0^{-1} f^0(t) + U^t u_0 + \int_0^t U^{t-s} L_1^{-1} f^1(s) ds.$$

Here

$$M_0^{-1}f^0(t) = \sum_{\lambda=\lambda_k} \frac{f_k(t)e_k}{M(\lambda_k)}, U^t u_0 = \sum_{k=1}^{\infty} \exp\left(\frac{M(\lambda_k)}{L(\lambda_k)}t\right) u_{0k} e_k, L_1^{-1}f^1(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{f_k(t)e_k}{L(\lambda_k)},$$

and the prime at the sum sign means that the summation is over the set $\{k \in \mathbb{N} : \lambda_k \neq \lambda\}$.

Comment 2.1. All the arguments above were carried out under the implicit assumption that only one root of the polynomial $L(s)$ coincides with some term of the sequence $\{\lambda_k\}$. However, these arguments are not difficult to extend to the case when several roots and even all the roots of the polynomial $L(s)$ coincide with the terms of the sequence $\{\lambda_k\}$.

Comment 2.2. If we return to the mathematical models (1) and (2) and consider them from the point of view of the approach suggested above, then we can see that in the case (1), non-negative solutions are possible (at $\lambda, \alpha \in \mathbb{R}_+$), and in the case of (2) such decisions can not be made (even with $f(t) \equiv 0$).

Conclusion

To continue the tradition laid down in [7], the next step should be the study of a stochastic model of the form (3). To date, the main results have already been obtained, but unlike [7] they are based not on the Ito–Stratonovich–Skorokhod approach, but on the Nelson–Glickich derivative [9]. In addition, it would be interesting to consider various generalizations of the Showalter–Sidorov condition [10]. Finally, it would be nice to consider the relations between the powers of the polynomials L and M , other than (4) [11–13].

The work was supported by Act 211 Government of the Russian Federation, contract № 02.A03.21.0011.

References

1. Barenblatt G.I., Zheltov Iu.P., Kochina I.N. Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in fissured rocks [strata]. *Journal of Applied Mathematics and Mechanics*, 1960, Vol. 24, Issue 5, pp. 1286–1303. DOI: 10.1016/0021-8928(60)90107-6
2. Hallaire M. Soil water movement in the film and vapor phase under the influence of evapotranspiration. Water and its conduction in soils. *Proceedings of XXXVII Annual Meeting of the Highway Research Board, Highway Research Board Special Report*, 1958, Vol. 40, pp. 88–105.
3. Chen P.J., Gurtin M.E. On a theory of heat conduction involving two temperatures. *Journal of Applied Mathematics and Physics (ZAMP)*, 1968, Vol. 19, Issue 4, pp. 614–627. DOI: 10.1007/BF01594969
4. Hoff N.J. Creep buckling. *The Aeronautical Quarterly*, 1956, Vol. 7, no. 1, pp. 1–20.
5. Sviridyuk G.A., Fedorov V.E. *Linear Sobolev type equations and degenerate semigroups of operators*. VSP, Utrecht–Boston–Köln–Tokyo, 2003, 216 p. DOI: 10.1515/9783110915501
6. Banasiak J., Arlotti L. *Perturbations of Positive Semigroups with Applications*, Springer-Verlag, London Limited, 2006, 438 p. DOI: 10.1007/1-84628-153-9
7. Chekroun M.D., Park E., Temam R. The Stampacchia maximum principle for stochastic partial equations and applications. *Journal of Differential Equations*, 2016, Vol. 260, Issue 3, pp. 2926–2972. DOI: 10.1016/j.jde.2015.10.022
8. Sviridyuk G.A., Zagrebina S.A. The Showalter–Sidorov problem as a phenomena of the Sobolev-type equations. *Izvestiya Irkutskogo Gosudarstvennogo Universiteta. Seriya “Matematika”*, Vol. 3, Issue 1, pp. 104–125. (in Russ.).
9. Sviridyuk G.A., Manakova N.A. Dynamic models of Sobolev type with the Showalter–Sidorov condition and additive “noises”. *Bulletin of the South Ural State University. Series “Mathematical Modelling, Programming & Computer Software”*, 2014, Vol. 7, no. 1, pp. 90–103. (in Russ.). DOI: 10.14529/mmp140108
10. Zagrebina S.A. A multipoint initial-final value problem for a linear model of plane-parallel thermal convection in viscoelastic incompressible fluid. *Bulletin of the South Ural State University. Series “Mathematical Modelling, Programming & Computer Software”*, 2014, Vol. 7, no. 3, pp. 5–22. DOI: 10.14529/mmp140301

11. Favini A., Sviridyuk G.A., Manakova N.A. Linear Sobolev Type Equations with Relatively p-Sectorial Operators in Space of “noises”. *Abstract and Applied Analysis*, 2015, Vol. 2015, Article ID 697410. DOI: 10.1155/2015/697410

12. Favini A., Sviridyuk G.A., Sagadeeva M.A. Linear Sobolev type equations with relatively p-radial operators in space of “noises”. *Mediterranean Journal of Mathematics*, 2016, Vol. 13, no. 6, pp. 4607–4621. DOI 10.1007/s00009-016-0765-x

13. Favini A., Sviridyuk G.A., Zamyshlyayeva A.A. One class of Sobolev type equations of higher order with additive “white noise”. *Communications on Pure and Applied Analysis*, 2016, Vol. 15, no. 1, pp. 185–196. DOI:10.3934/cpaa.2016.15.185

Received September 23, 2017

*Bulletin of the South Ural State University
Series “Mathematics. Mechanics. Physics”
2017, vol. 9, no. 4, pp. 27–35*

УДК 517.9

DOI: 10.14529/mmph170404

НЕКОТОРЫЕ МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ СОБОЛЕВСКОГО ТИПА С ОТНОСИТЕЛЬНО ПОЗИТИВНЫМИ ОПЕРАТОРАМИ В ПРОСТРАНСТВАХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЕЙ

Н.Н. Соловьёва, С.А. Загребина, Г.А. Свиридюк

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: zargebinasa@susu.ru

В пространствах последовательностей, являющихся аналогами функциональных пространств Соболева, рассмотрена математическая модель, прототипами которой служат уравнение Баренблатта–Желтова–Кочиной и уравнение Хоффа. Отметим, что эти уравнения являются вырожденными уравнениями или уравнениями соболевского типа. Для таких уравнений отличительной чертой служат феномены несуществования и неединственности решений. Поэтому нахождение условий существования позитивных решений таких уравнений – актуальное направление исследований. В статье описаны условия, достаточные для существования позитивных решений в рассмотренной математической модели. Фундаментом наших исследований стали теория позитивных полугрупп операторов и теория вырожденных голоморфных групп операторов. В результате слияния этих теорий получилась новая теория вырожденных позитивных голоморфных групп операторов. Авторы надеются, что результаты новой теории найдут применение в экономических и инженерных задачах.

Ключевые слова: соболевы пространства последовательностей; модели соболевского типа; вырожденные позитивные голоморфные группы операторов.

Литература

1. Баренблатт, Г.И. Об основных представлениях теории фильтрации однородных жидкостей в трещиноватых породах / Г.И. Баренблатт, Ю.П. Желтов, И.Н. Кочина // Прикладная математика и механика. – 1960. – Т. 24, № 5. – С. 58–73.

2. Hallaire, M. Soil water movement in the film and vapor phase under the influence of evapotranspiration. Water and its conduction in soils / M. Hallaire // Proceedings of XXXVII Annual Meeting of the Highway Research Board, Highway Research Board Special Report. – 1958. – Vol. 40. – P. 88–105.

3. Chen, P.J. On a Theory of Heat Conduction Involving Two Temperatures / P.J. Chen, M.E. Gurtin // Journal of Applied Mathematics and Physics (ZAMP). – 1968. – Vol. 19, Issue 4. – P. 614–627.

4. Hoff, N.J. Creep buckling / N.J. Hoff // The Aeronautical Quarterly. – 1956. – Vol. 7, no. 1. – P. 1–20.

5. Sviridyuk, G.A. Linear Sobolev Type Equations and Degenerate Semigroups of Operators / G.A. Sviridyuk, V.E. Fedorov. – Utrecht; Boston; Köln; Tokyo: VSP, 2003. – 216 p.

6. Banasiak, J. Perturbations of Positive Semigroups with Applications / J. Banasiak, L. Arlotti. – Springer-Verlag, London Limited, 2006. – 438 p.

7. Chekroun, M.D. The Stampacchia maximum principle for stochastic partial equations and applications / M.D. Chekroun, E. Park, R. Temam // Journal of Differential Equations. – 2016. – Vol. 260, Issue 3. – P. 2926–2972.

8. Свиридюк, Г.А. Задача Шоуолтера – Сидорова как феномен уравнений соболевского типа / Г.А. Свиридюк, С.А. Загребина // Известия Иркутского государственного университета. Серия «Математика». – 2010. – Т. 3, № 1. – С. 104–125.

9. Свиридюк, Г.А. Динамические модели соболевского типа с условием Шоуолтера–Сидорова и аддитивными «шумами» / Г.А. Свиридюк, Н.А. Манакова // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2014. – Т. 7, № 1. – С. 90–103.

10. Zagrebina, S.A. A multipoint initial-final value problem for a linear model of plane-parallel thermal convection in viscoelastic incompressible fluid / S.A. Zagrebina // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2014. – Т. 7, № 3. – С. 5–22.

11. Favini, A. Linear Sobolev Type Equations with Relatively p -Sectorial Operators in Space of “noises” / A. Favini, G.A. Sviridyuk, N.A. Manakova // Abstract and Applied Analysis. – 2015. – Vol. 2015. – Article ID 697410.

12. Favini, A. Linear Sobolev type equations with relatively p -radial operators in space of “noises” / A. Favini, G.A. Sviridyuk, M.A. Sagadeeva // Mediterranean Journal of Mathematics. – 2016. – Vol. 13, no. 6. – P. 4607–4621.

13. Favini, A. One class of Sobolev type equations of higher order with additive “white noise” / A. Favini, G.A. Sviridyuk, A.A. Zamyshlyeva // Communications on Pure and Applied Analysis. – 2016. – Vol. 15, no. 1. – P. 185–196.

Поступила в редакцию 23 сентября 2017 г.

БЫСТРОЕ РЕШЕНИЕ МОДЕЛЬНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ПУАССОНА

А.Л. Ушаков

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: ushakoal@susu.ru

Рассматривается уравнение Пуассона в прямоугольной области при смешанных краевых условиях. Его численное решение с помощью итерационных факторизаций и фиктивного продолжения сводится к решению систем линейных алгебраических уравнений с треугольными матрицами, в которых количество ненулевых элементов в каждой строке не более трех. При достаточно малой погрешности аппроксимации решаемой задачи задаваемая относительная погрешность численного метода достигается за несколько итераций. Предлагаемый итерационный метод является почти прямым методом, асимптотически оптимальным по количеству арифметических операций. Разработан итерационный метод для указанной модельной задачи. Эта задача получается в методах фиктивных компонент при решении краевых задач для эллиптических дифференциальных уравнений второго и четвертого порядков в плоских областях. Предложен алгоритм для реализации численного метода с автоматическим выбором итерационных параметров на основе метода скорейшего спуска. Задан критерий остановки итерационного процесса, при достижении заранее задаваемой относительной погрешности решения. Приводятся графические результаты вычислительных экспериментов, подтверждающие асимптотическую оптимальность метода по вычислительным затратам. Построение метода основывается на использовании комплексного анализа.

Ключевые слова: итерационные факторизации; фиктивное продолжение.

Введение

Рассматривается уравнение Пуассона в прямоугольнике, когда на двух смежных сторонах прямоугольника задано условие Дирихле, а на двух других сторонах выполняется условие Неймана. Для разностного аналога этой краевой задачи в виде системы линейных алгебраических уравнений строится факторизованный переобуславливатель попеременно треугольного вида. Такая краевая задача возникает при решении задач в работе [1]. Разработанная методика аналогична методам фиктивных компонент, но использует комплексный анализ.

Непрерывная задача для применения продолжения

Рассматривается задача

$$\tilde{u}_1 \in \tilde{W}_1 : A(\tilde{u}_1, \tilde{v}_1) = l_1(\tilde{v}_1) \quad \forall \tilde{v}_1 \in \tilde{W}_1, \quad l_1 \in \tilde{W}' \quad (1)$$

где

$$\tilde{W} = \tilde{W}(\Omega) = \left\{ \tilde{v} \in W_2^1(\Omega) : \tilde{v}|_{\Gamma_1} = 0 \right\}$$

пространство функций Соболева на прямоугольной области

$$\Omega = (0; b_1) \times (0; b_2), \quad \text{с } \Gamma_1 = \{b_1\} \times (0; b_2) \cup (0; b_1) \times \{b_2\},$$

а

$$A(\tilde{u}_1, \tilde{v}_1) = \int_{\Omega} (\tilde{u}_{1x} \tilde{v}_{1x} + \tilde{u}_{1y} \tilde{v}_{1y}) d\Omega$$

билинейная форма, когда заданы константы $b_1, b_2 > 0$. Решение задачи из (1) существует и единственно [2, 3].

При

$$l_1(\tilde{v}_1) = \int_{\Omega} \tilde{f}_1 \tilde{v}_1 d\Omega,$$

где \check{f}_1 – заданная суммируемая с квадратом функция, задача из (1) представляется в виде

$$-\Delta \check{u}_1 = \check{f}_1, \quad \check{u}_1|_{\Gamma_1} = 0, \quad \frac{\partial \check{u}_1}{\partial \bar{n}}|_{\Gamma_2} = 0, \quad (2)$$

где $\Gamma_2 = \{0\} \times (0; b_2) \cup (0; b_1) \times \{0\}$, \bar{n} – внешняя нормаль к $\partial\Omega$.

Продолжаемая дискретная задача

Рассматривается система линейных алгебраических уравнений, которая получается при дискретизации (1), (2) по методу сумматорных тождеств

$$\bar{u}_1 \in \mathbb{R}^N: A\bar{u}_1 = \bar{f}_1, \quad \bar{f}_1 \in \mathbb{R}^N, \quad (3)$$

здесь векторы

$$\bar{v}_1 \in \mathbb{R}^N: \bar{v}_1 = (v_{1,1}, \dots, v_{1,N})', \quad N = m \cdot n, \quad m, n \in \mathbb{N},$$

полагается, что

$$v_{1,m(j-1)+i} = v_{1,i,j}, \quad i = 1, \dots, m, \quad j = 1, \dots, n,$$

а $v_{1,i,j}$ – значения функций дискретных аргументов соответствующих узлам сетки,

$$(x_i, y_j) = ((i-0,5)h_1, (j-0,5)h_2),$$

когда выбираются следующие шаги сетки

$$h_1 = b_1 / (n + 0,5), \quad h_2 = b_2 / (n + 0,5),$$

которая состоит из указанных выше узлов, а матрица A размерности $N \times N$, определяется так:

$$\langle A\bar{u}_1, \bar{v}_1 \rangle = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n ((u_{1,i+1,j} - u_{1,i,j})(v_{1,i+1,j} - v_{1,i,j})h_1^{-2} + (u_{1,i,j+1} - u_{1,i,j})(v_{1,i,j+1} - v_{1,i,j})h_2^{-2})h_1h_2,$$

$$u_{1,i,n+1} = v_{1,i,n+1} = 0, \quad i = 1, \dots, m, \quad u_{1,m+1,j} = v_{1,m+1,j} = 0, \quad j = 1, \dots, n,$$

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

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

Если функция f_1 непрерывна на области Ω , то возможно положить

$$f_{1,i,j} = f(x_i, y_j), \quad i = 1, \dots, m, \quad j = 1, \dots, n.$$

Решение задачи в (3) существует, единственно, так как $A > 0$.

Фиктивно продолженная дискретная задача

Строится фиктивное продолжение задачи из (3)

$$\bar{u} \in \mathbb{R}^{2N}: D\bar{u} = \bar{f}, \quad \bar{f} \in \mathbb{R}^{2N}, \quad \bar{f}_2 = \bar{0}, \quad (4)$$

здесь векторы

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

где блочная, верхнетреугольная матрица D размерности $2N \times 2N$ такая, что

$$D_{11} = A, \quad D_{12} = \theta, \quad D_{21} = 0, \quad D_{22} = A,$$

а матрицы

$$\theta = \nabla_x' \nabla_y - \nabla_y' \nabla_x, \quad A = \nabla_x' \nabla_x + \nabla_y' \nabla_y,$$

матрицы ∇_x, ∇_y размерности $N \times N$ задаются по формулам:

$$\langle \nabla_x \bar{u}_1, \bar{v}_1 \rangle = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (-(u_{1,i+1,j} - u_{1,i,j})h_1^{-1} v_{1,i,j})h_1 h_2, \quad u_{1,m+1,j} = v_{1,m+1,j} = 0, \quad j = 1, \dots, n,$$

$$\langle \nabla_y \bar{u}_1, \bar{v}_1 \rangle = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n (-(u_{1,i,j+1} - u_{1,i,j})h_2^{-1} v_{1,i,j})h_1 h_2, \quad u_{1,i,n+1} = v_{1,i,n+1} = 0, \quad i = 1, \dots, m.$$

Вводятся подпространства векторов в пространстве \mathbb{R}^{2N} :

$$\bar{W}_1 = \{ \bar{v} = (\bar{v}_1', \bar{v}_2')' : \bar{v}_2 = \bar{0} \}, \quad \bar{W}_2 = \{ \bar{v} = (\bar{v}_1', \bar{v}_2')' : A\bar{v}_1 - \theta\bar{v}_2 = \bar{0} \}.$$

Лемма 1. Решение задачи из (4) $\bar{u} \in \bar{W}_1$ существует и единственно.

Итерационные факторизации на фиктивном продолжении

Определяется блочная матрица C размерности $2N \times 2N$ так, что

$$C_{11} = C_{22} = A, \quad C_{12} = -\theta, \quad C_{21} = \theta.$$

Для решения задачи из (4) строится итерационный процесс:

$$\bar{u}^k \in \mathbb{R}^{2N} : C(\bar{u}^k - \bar{u}^{k-1}) = -\tau_k (D\bar{u}^{k-1} - \bar{f}), \quad k \in \mathbb{N}, \quad \tau_k > 0, \quad \forall \bar{u}^0 \in \bar{W}_1. \quad (5)$$

В итерационном процессе из (5) получается задача с факторизующимся оператором следующего вида

$$\bar{U} \in \mathbb{C}^N : LL^*\bar{U} = \bar{F}, \quad \bar{F} \in \mathbb{C}^N,$$

которая расщепляется на более простые задачи

$$\bar{Q} \in \mathbb{C}^N, \quad L\bar{Q} = \bar{F}, \quad \bar{F} \in \mathbb{C}^N,$$

$$\bar{U} \in \mathbb{C}^N, \quad L^*\bar{U} = \bar{Q}, \quad \bar{Q} \in \mathbb{C}^N,$$

здесь матрицы

$$L = \nabla_x' - i\nabla_y', \quad L^* = \bar{L}' = \nabla_x + i\nabla_y, \quad LL^* = (\nabla_x' - i\nabla_y')(\nabla_x + i\nabla_y) = A + i\theta,$$

поэтому

$$(A + i\theta)(\bar{u}_1 + i\bar{u}_2) = \bar{f}_1 + i\bar{f}_2$$

или

$$\begin{cases} A\bar{u}_1 - \theta\bar{u}_2 = \bar{f}_1, & \bar{u}_1 + i\bar{u}_2 = \bar{U}, \\ \theta\bar{u}_1 + A\bar{u}_2 = \bar{f}_2, & \bar{f}_1 + i\bar{f}_2 = \bar{F}, \end{cases}$$

т. е. на каждом шаге итерационного процесса из (5) действительно возникает задача вида

$$C\bar{u} = \bar{f}, \quad \bar{u} = (\bar{u}_1', \bar{u}_2')', \quad \bar{f} = (\bar{f}_1', \bar{f}_2')'.$$

Лемма 2. Как только в итерационном процессе из (5) $\bar{u}^{k-1} = \bar{u}$, так сразу $\bar{u}^k = \bar{u} \quad \forall k \in \mathbb{N}$.

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

Лемма 3. Для итерационного процесса из (5) выполняется

$$A\bar{\psi}_1^k - \theta\bar{\psi}_2^k = (1 - \tau_k)(A\bar{\psi}_1^{k-1} - \theta\bar{\psi}_2^{k-1}),$$

а при $\tau_1 = 1$, получается, что $\bar{\psi}^k \in \bar{W}_2 \quad \forall k \in \mathbb{N}$.

Вводится норма

$$\|\bar{v}_1\|_A = \sqrt{\langle A\bar{v}_1, \bar{v}_1 \rangle}.$$

Лемма 4. Выполняется следующее равенство

$$\langle C\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle = \langle A\bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle - \langle A\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle \quad \forall \bar{\psi} \in \bar{W}_2,$$

здесь

$$\langle \bar{\psi}, \bar{v} \rangle = \langle \bar{\psi}_1, \bar{v}_1 \rangle + \langle \bar{\psi}_2, \bar{v}_2 \rangle \quad \bar{\psi}, \bar{v} \in \mathbb{R}^{2N}.$$

Доказательство. Так как

$$A\bar{\psi}_1 - \theta\bar{\psi}_2 = 0, \quad \theta' = -\theta,$$

имеем

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

Предположение 1. (О продолжении мнимой части на действительную часть). Имеет место неравенство

$$\exists \alpha_1 \in (0; 1) : \langle A\bar{v}_1, \bar{v}_1 \rangle \leq \alpha_1 \langle A\bar{v}_2, \bar{v}_2 \rangle \quad \forall \bar{v} \in \bar{W}_2.$$

Заметим ($\gamma = (1 - \alpha_1)^{-1}$ или $\alpha_1 = 1 - \gamma^{-1}$), что

$$\exists \gamma \in (1; +\infty) : \langle A\bar{v}_2, \bar{v}_2 \rangle \leq \gamma \langle C\bar{v}, \bar{v} \rangle = \gamma (\langle A\bar{v}_2, \bar{v}_2 \rangle - \langle A\bar{v}_1, \bar{v}_1 \rangle) \quad \forall \bar{v} \in \bar{W}_2,$$

потому, что матрица $A > 0$ и матрица $C > 0$. Последнее можно получить

$$(C\bar{\psi}, \bar{\psi}) = (\nabla_x \bar{\psi}_1 - \nabla_y \bar{\psi}_2)^2 + (\nabla_y \bar{\psi}_1 + \nabla_x \bar{\psi}_2)^2 > 0 \quad \forall \bar{\psi} \neq \bar{0},$$

учитывая, что

$$(\nabla_x + i\nabla_y)(\bar{\psi}_1 + i\bar{\psi}_2) \neq \bar{0} \quad \forall \bar{\psi} \neq \bar{0}.$$

Заметим, что

$$\exists \lambda_0^{-1} \in (0; +\infty) : 0 \leq \langle A\bar{v}_1, \bar{v}_1 \rangle = \langle \theta\bar{v}_2, \bar{v}_1 \rangle = \langle A^{-1}\theta\bar{v}_2, \theta\bar{v}_2 \rangle \leq \lambda_0^{-1} \langle \theta\bar{v}_2, \theta\bar{v}_2 \rangle \rightarrow 0, \quad \text{при } h_1, h_2 \rightarrow 0,$$

тогда

$$\langle A\bar{v}_1, \bar{v}_1 \rangle \rightarrow 0, \quad \bar{v}_1 \rightarrow \bar{0}, \quad \text{при } h_1, h_2 \rightarrow 0,$$

потому что

$$\theta\bar{v}_2 = (\nabla_x' \nabla_y - \nabla_y' \nabla_x) \bar{v}_2 \rightarrow \bar{0}, \quad \text{при } h_1, h_2 \rightarrow 0 \quad \forall \bar{v} \in \bar{W}_2,$$

из формулы Тейлора, когда \bar{v}_2 – дискретные аналоги дифференцируемых необходимое число раз функций.

Лемма 5. *Выполняются неравенства*

$$\frac{1 - \alpha_1}{\alpha_1} \langle A\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle \leq (1 - \alpha_1) \langle A\bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle \leq \langle C\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle, \quad \forall \bar{\psi} \in \bar{W}_2.$$

Доказательство. Используя, что

$$\langle A\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle \leq \alpha_1 \langle A\bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle, \quad \forall \bar{\psi} \in \bar{W}_2,$$

получаем

$$\begin{aligned} \frac{1 - \alpha_1}{\alpha_1} \langle A\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle &\leq (1 - \alpha_1) \langle A\bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle = \langle A\bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle - \alpha_1 \langle A\bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle \leq \\ &\leq \langle A\bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle - \langle A\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle = \langle C\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle, \quad \forall \bar{\psi} \in \bar{W}_2. \end{aligned}$$

Лемма 6. *В итерационном процессе из (5) при $k=1$, $\tau_1=1$ выполняются оценки*

$$\langle C\bar{\psi}^1, \bar{\psi}^1 \rangle \leq \frac{\alpha_1}{1 - \alpha_1} \langle A\bar{\psi}_1^0, \bar{\psi}_1^0 \rangle = (\gamma - 1) \langle C\bar{\psi}^0, \bar{\psi}^0 \rangle,$$

$$\|\bar{\psi}_1^1\|_A \leq \frac{\alpha_1}{1 - \alpha_1} \|\bar{\psi}_1^0\|_A = (\gamma - 1) \|\bar{\psi}_1^0\|_A.$$

Доказательство. Для итерационного процесса выполняется

$$C(\bar{\psi}^1 - \bar{\psi}^0) = -D\bar{\psi}^0,$$

$$\langle C(\bar{\psi}^1 - \bar{\psi}^0), \bar{\psi}^1 \rangle = \langle C\bar{\psi}^1, \bar{\psi}^1 \rangle = -\langle D\bar{\psi}^0, \bar{\psi}^1 \rangle = -\langle A\bar{\psi}_1^0, \bar{\psi}_1^1 \rangle \leq \|\bar{\psi}_1^0\|_A \|\bar{\psi}_1^1\|_A,$$

тогда

$$\langle C\bar{\psi}^1, \bar{\psi}^1 \rangle \leq \frac{\langle A\bar{\psi}_1^1, \bar{\psi}_1^1 \rangle}{\langle C\bar{\psi}^1, \bar{\psi}^1 \rangle} \langle A\bar{\psi}_1^0, \bar{\psi}_1^0 \rangle \leq \frac{\alpha_1}{1 - \alpha_1} \langle A\bar{\psi}_1^0, \bar{\psi}_1^0 \rangle = \frac{\alpha_1}{1 - \alpha_1} \langle C\bar{\psi}^0, \bar{\psi}^0 \rangle,$$

учитывая, что

$$\begin{aligned} \langle A\bar{\psi}_1^1, \bar{\psi}_1^1 \rangle &\leq \alpha_1 \langle A\bar{\psi}_2^1, \bar{\psi}_2^1 \rangle, \\ \langle C\bar{\psi}^1, \bar{\psi}^1 \rangle &= \langle A\bar{\psi}_2^1, \bar{\psi}_2^1 \rangle - \langle A\bar{\psi}_1^1, \bar{\psi}_1^1 \rangle \geq (1 - \alpha_1) \langle A\bar{\psi}_2^1, \bar{\psi}_2^1 \rangle. \end{aligned}$$

По лемме 5

$$\frac{1 - \alpha_1}{\alpha_1} \langle A\bar{\psi}_1^1, \bar{\psi}_1^1 \rangle \leq \langle C\bar{\psi}^1, \bar{\psi}^1 \rangle = \frac{\alpha_1}{1 - \alpha_1} \langle C\bar{\psi}_1^0, \bar{\psi}_1^0 \rangle,$$

так получается вторая оценка.

Лемма 7. *Имеют место оценки*

$$\exists \gamma \in (1; +\infty): \langle C\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle \leq \langle D\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle \leq \gamma \langle C\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle \quad \forall \bar{\psi} \in \bar{W}_2.$$

Доказательство. Отметим, что

$$\begin{aligned} (1 - \alpha_1) \langle D\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle &\leq (1 - \alpha_1) \langle A\bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle \leq \langle C\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle = \\ &= \langle A\bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle - \langle A\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle \leq \langle A\bar{\psi}_2, \bar{\psi}_2 \rangle = \langle D\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle \quad \forall \bar{\psi} \in \bar{W}_2, \end{aligned}$$

а это позволяет завершить доказательство.

Лемма 8. *Если в итерационном процессе из (5) $k > 1$,*

$$0 < \tau_k = \tau = \frac{2}{1 + \gamma}, \quad q = \frac{\alpha_1}{2 - \alpha_1} = \frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} < 1,$$

то

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

Доказательство. Из итерационного процесса

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

тогда

$$\begin{aligned} \langle C\bar{\psi}^k, \bar{\psi}^k \rangle &= \langle CT\bar{\psi}^{k-1}, T\bar{\psi}^{k-1} \rangle \leq \sup_{\bar{\psi} \in \bar{V}_2} \frac{\langle CT\bar{\psi}, T\bar{\psi} \rangle}{\langle C\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle} \langle C\bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle = \\ &= \sup_{\bar{\psi} \in \bar{V}_2} \left(\frac{\langle CT\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle}{\langle C\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle} \right)^2 \langle C\bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle = \sup_{\bar{\psi} \in \bar{V}_2} \left(\frac{\langle (C - \tau DT)\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle}{\langle C\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle} \right)^2 \langle C\bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle = \\ &= \sup_{\bar{\psi} \in \bar{V}_2} \left(1 - \tau \frac{\langle D\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle}{\langle C\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle} \right)^2 \langle C\bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle = \max \left\{ |1 - \tau|^2 |1 - \tau\gamma|^2 \right\} \langle C\bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle = q^2 \langle C\bar{\psi}^{k-1}, \bar{\psi}^{k-1} \rangle. \end{aligned}$$

Теорема 1. *Для итерационного процесса из (5)*

$$\|\bar{u}_1^k - \bar{u}_1\|_A \leq \varepsilon_1 \|\bar{u}_1^0 - \bar{u}_1\|_A,$$

если

$$\tau_1 = 1, \quad \tau_k = \tau = 2/(1 + \gamma), \quad k \in \mathbb{N} \setminus \{1\},$$

получается, что

$$\varepsilon_1 \leq (\gamma - 1)q^{k-1} = (\gamma - 1) \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right)^k.$$

Доказательство. По лемме 5 получается

$$\frac{1 - \alpha_1}{\alpha_1} \langle A\bar{\psi}_1, \bar{\psi}_1 \rangle \leq \langle C\bar{\psi}, \bar{\psi} \rangle \quad \forall \bar{\psi} \in \bar{W}_2,$$

по лемме 6 имеем

$$\langle C\bar{\psi}^1, \bar{\psi}^1 \rangle \leq \frac{\alpha_1}{1 - \alpha_1} \langle A\bar{\psi}_1^0, \bar{\psi}_1^0 \rangle = (\gamma - 1) \langle A\bar{\psi}_1^0, \bar{\psi}_1^0 \rangle.$$

Вывод. Исходя из вида матриц L, L^* , нужно сказать, что задача из (3) при N неизвестных, по теореме 1, построенным итерационным процессом из (5), решается с относительной погрешностью ε_1 за $O(N \ln \varepsilon_1^{-1})$ арифметических операций. Можно отметить, что при достаточно малых параметрах дискретизации для решения требуется $O(N)$ операций, т. е. итерационный процесс, сходится за несколько итераций и превращается в почти прямой метод.

Эксперименты при вычислении решения модельной задачи для уравнения Пуассона

Решается задача, если заданы компоненты правой части системы линейных алгебраических уравнений

$$f_{1,m(i-1)+j} = f_{1,i,j} = (b_1^2 + b_2^2 - ((i-0,5)h_1)^2 - ((j-0,5)h_2)^2)/2, \quad i=1,\dots,m, \quad j=1,\dots,n, \quad m=n=2,\dots,125,$$

где

$$h_1 = b_1/(m+0,5), \quad h_2 = b_2/(n+0,5), \quad b_1 = b_2 = 2,5$$

итерационным процессом из (5). Для выбора итерационных параметров используется метод скорейшего спуска [4]. Тогда для решаемых задач в итерационном процессе применяется следующий алгоритм вычислений:

1. Ищется первое приближение $\bar{u}^1 \in \mathbb{R}^{2N} : C\bar{u}^1 = \bar{f}$;
2. Задается первая невязка $\bar{r}^1 : \bar{r}_1^1 = \bar{0}, \bar{r}_2^1 = A\bar{u}_2^1$;
3. Определяется квадрат нормы ошибки $E_1 = \|\bar{\psi}_2^1\|_A^2 = \langle A\bar{\psi}_2^1, \bar{\psi}_2^1 \rangle = \langle \bar{r}_2^1, \bar{u}_2^1 \rangle$;
4. Ищется поправка $\bar{w}^{k-1} \in \mathbb{R}^{2N} : C\bar{w}^{k-1} = \bar{r}^{k-1}, k \in \mathbb{N} \setminus \{1\}$;
5. Определяется итерационный параметр

$$\tau_k = \frac{\langle \bar{r}^{k-1}, \bar{w}^{k-1} \rangle}{\langle D\bar{w}^{k-1}, \bar{w}^{k-1} \rangle} = \frac{\langle \bar{r}_2^{k-1}, \bar{w}_2^{k-1} \rangle}{\langle A\bar{w}_2^{k-1}, \bar{w}_2^{k-1} \rangle} \quad k \in \mathbb{N} \setminus \{1\};$$

6. Определяется новое приближение $\bar{u}^k = \bar{u}^{k-1} - \tau_k \bar{w}^{k-1} \quad k \in \mathbb{N} \setminus \{1\}$;
7. Задается новая невязка $\bar{r}^k : \bar{r}_1^k = \bar{0}, \bar{r}_2^k = A\bar{u}_2^k, k \in \mathbb{N} \setminus \{1\}$;
8. Определяется квадрат нормы новой ошибки

$$E_k = \|\bar{\psi}_2^k\|_A^2 = \langle A\bar{\psi}_2^k, \bar{\psi}_2^k \rangle = \langle \bar{r}_2^k, \bar{u}_2^k \rangle \quad k \in \mathbb{N} \setminus \{1\};$$

9. Ставится условие остановки итераций $E_k/E_1 < E^2, E \in (0; 1), k \in \mathbb{N} \setminus \{1\}$.

Заметим, что в условии остановки итерационного процесса $E \in (0; 1)$ – задаваемая относительная погрешность. Можно отметить, что вычисления, при реализации на ЭВМ, экспериментально подтверждают асимптотическую независимость k – числа итераций от $m(n)$ – числа узлов сетки по направлениям осей $Ox(Oy)$ для достижения E – заданной относительной погрешности при решении систем линейных алгебраических уравнений (см. рисунок).

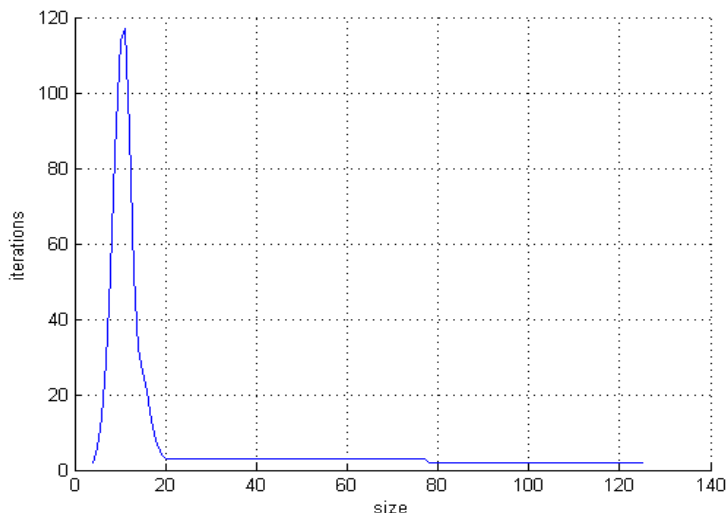


График функции k – числа итераций от $m(n)$ – числа узлов сетки по направлениям осей $Ox(Oy)$ при заданной относительной погрешности вычислений $E = 0,001$

Статья выполнена при поддержке Правительства РФ (Постановление № 211 от 16.03.2013 г.), соглашение № 02.A03.21.0011

Литература

1. Ушаков, А.Л. О моделировании деформаций пластин / А.Л. Ушаков // Вестник ЮУрГУ. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2015. – Том. 8, № 2. – С. 138–142.
2. Оганесян, Л.А. Вариационно-разностные методы решения эллиптических уравнений / Л.А. Оганесян, Л.А. Руховец. – Ереван: изд-во АН АрмССР, 1979. – 235 с.
3. Обен, Ж.-П. Приближённое решение эллиптических краевых задач / Ж.-П. Обен. – М.: Мир, 1977. – 383 с.
4. Самарский, А.А. Методы решения сеточных уравнений / А.А. Самарский, Е.С. Николаев. – М.: Наука, 1978. – 592 с.

Поступила в редакцию 31 августа 2017 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2017, vol. 9, no. 4, pp. 36–42*

DOI: 10.14529/mmph170405

FAST SOLUTION OF THE MODEL PROBLEM FOR POISSON'S EQUATION

A.L. Ushakov

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: ushakoal@susu.ru

Poisson's equation in rectangular area under the mixed regional conditions is considered. Its numerical solution by means of iterative factorizations and fictitious continuation amounts to the solution of the systems of linear algebraic equations with triangular matrixes, in which the quantity of nonzero elements in every line is less than three. At rather insignificant error of approximation of the problem under consideration the set relative error of a numerical method is reached by some iterations. The given iterative method is almost a direct method, asymptotically optimum by the number of arithmetic operations. The iterative method is developed for the specified model problem. This problem turns out to be in the methods of fictitious components at the solution of boundary problems for elliptic differential equations of the second and fourth orders in flat areas. The algorithm for realization of a numerical method with an automatic choice of iterative parameters on the basis of a method of the fastest descent is offered. The criterion to stop an iterative process is set at the achievement of the set relative error of the solution. The graphic results of computing experiments confirming an asymptotic optimality of the method on computing expenses are given. The developing of the method is based on the use of the complex analysis.

Keywords: iterative factorizations; fictitious continuation.

References

1. Ushakov A.L. About Modelling of Deformations of Plates. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Mathematical Modelling, Programming & Computer Software*, 2015, Vol. 8, no. 2, pp. 138–142. (in Russ.). DOI: 10.14529/mmp150213
2. Oganesyanyan L.A., Rukhovets L.A. *Variatsionno-raznostnye metody resheniya ellipticheskikh uravneniy* (Variation-difference methods for solving elliptic equations), Erevan: izd-vo AN ArmSSR Publ., 1979, 235 p. (in Russ.).
3. Oben Zh.-P. *Priblizhyennoe reshenie ellipticheskikh kraevykh zadach* (Approximate solution of elliptic boundary value problems). Moscow, Mir Publ., 1977, 383 p. (in Russ.). [Aubin J.-P. Approximation of elliptic boundary-value problems. New York, Wiley-Interscience, 1972. 360 p.]
4. Samarskiy A.A., Nikolaev E.S. *Metody resheniya setochnykh uravneniy* (Methods for solving grid equations), Moscow, Nauka Publ., 1978, 592 p. (in Russ.).

Received August 31, 2017

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕПЛОВОЙ СОСТАВЛЯЮЩЕЙ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ МОЛЕКУЛЯРНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Ю.М. Ковалев, О.А. Шершнева

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: kovalevym@susu.ru

Анализ существующих приближений для описания зависимости теплоемкости при постоянном объеме от температуры молекулярного кристалла показал, что рассмотренные приближения не позволяют адекватно описывать зависимость теплоемкости при постоянном объеме от температуры. Поэтому в данной работе для теплоемкости при постоянном объеме молекулярного кристалла было предложено такое приближение, которое позволило описать как низкочастотную, так и высокочастотную части колебательных спектров молекулярных кристаллов, и получить зависимость теплоемкости при постоянном объеме от температуры для молекулярных кристаллов нитросоединений, хорошо согласующуюся с известными зависимостями. Знание зависимости теплоемкости при постоянном объеме от температуры молекулярного кристалла имеет определяющее значение при построении уравнений состояния, которые являются замыкающими соотношениями математических моделей, описывающих распространение ударных волн, инициирование детонации в молекулярных кристаллах и т. д. Разделение частот нормальных колебаний на внутримолекулярные и колебания молекулы как целого (три колебания центра тяжести молекулы и три колебания углов Эйлера) позволило применять методы квантовой химии для определения вклада внутримолекулярных колебаний в величину теплоемкости при постоянном объеме. Проведенный в данной работе анализ предлагаемого приближения показал, что для молекулярных кристаллов гексогена, ТЭНа, тротила, тетрила и ТАТБ значения относительной теплоемкости при постоянном объеме могут быть описаны универсальной кривой с одним параметром равным 600 К.

Ключевые слова: уравнение состояния; молекулярный кристалл; энергия Гельмгольца; постоянная Планка; постоянная Больцмана; приближение Дебая; приближение Эйнштейна.

Введение

Развитие современной вычислительной техники позволяет разрабатывать все более сложные математические модели для описания физики быстропротекающих процессов. Законы сохранения массы импульса и энергии, лежащие в основе математических моделей, требуют построения замыкающих зависимостей между входящими в уравнения сохранения величинами – уравнения состояния. Уравнения состояния определяют фундаментальную связь между термодинамическими параметрами, не зависящую от способа достижения тех или иных значений этих параметров. Математические модели, определяющие термодинамические свойства вещества, постоянно совершенствуются. Несмотря на то, что решению этой задачи посвящено достаточно большое количество как экспериментальных, так и теоретических работ, теория построения уравнений состояния далека от своего завершения, особенно это касается молекулярных кристаллов нитросоединений, которые являются твердыми взрывчатыми веществами (ВВ). Это связано с тем, что теоретическое определение зависимостей, характеризующих поведение ВВ осложняется большим числом внутренних степеней свободы молекул, входящих в состав кристалла. Трудности расчета межчастичного взаимодействия в молекулярных кристаллах приводят к тому, что описание термодинамических характеристик обычно осуществляется в рамках полуэмпирических подходов. При таком подходе функциональная зависимость термодинамического потенциала определяется исходя из теоретических соображений, а выбор некоторых коэффициентов этой зависимости рассчитывается из условия наилучшего совпадения с экспериментальными данными.

В настоящее время принято считать, что в уравнения состояния молекулярных кристаллов входит две составляющие: тепловая и «холодная» [1, 2]. Тепловая составляющая определяется колебательным движением молекул, входящих в состав кристалла, а холодная составляющая – изменением энергии взаимодействия, как внутри молекулы, так и между молекулами, входящих в состав кристалла, в зависимости от объема. Как было показано в работе [3], традиционные приближения не дают возможности получать правильные значения характеристических температур для молекулярных кристаллов нитросоединений по известным экспериментальным данным, и для их определения необходимо разрабатывать специальные методы и приближения.

Целью настоящего исследования является построение зависимости теплоемкости при постоянном объеме от температуры, что позволит в дальнейшем моделировать тепловую часть уравнений состояния молекулярных кристаллов.

Определение зависимости теплоемкости при постоянном объеме от температуры молекулярных кристаллов

Термодинамические свойства вещества полностью определяются, если известен один из термодинамических потенциалов. Удобно исходить из определения свободной энергии Гельмгольца $F(V, T)$, которая наиболее простым образом связана с моделью строения вещества [1, 4, 5]:

$$F = U + E_0 + kT \sum_{\alpha} \ln(1 - \exp(-\frac{h\omega_{\alpha}}{kT})), \quad E_0 = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} h\omega_{\alpha} . \quad (1)$$

Здесь U – энергия взаимодействия между атомами; V – удельный объем; T – температура тела; h – постоянная Планка; k – постоянная Больцмана; ω_{α} – частоты нормальных колебаний; E_0 – энергия нулевых колебаний.

Из потенциала Гельмгольца легко определяется теплоемкость при постоянном объеме C_V . Однако, уже здесь начинаются проблемы, связанные с тем, что в эксперименте получают данные по теплоемкости при постоянном давлении C_P . В силу того, что при температурах, при которых проводятся эксперименты, присутствует ангармонизм, то теплоемкости при постоянном объеме и постоянном давлении не совпадают. Легко показать, что связь между теплоемкостями определяется следующим равенством [3], в которое входит теплоемкость при постоянном давлении C_P , изобарический коэффициент объемного расширения α , адиабатическая скорость звука C_S и температура T

$$C_V = C_P^2 / (C_P + T\alpha^2 C_S^2).$$

В качестве исходных данных для определения начального теплового состояния молекулярного кристалла были использованы экспериментальные значения соответствующих величин, приведенные в справочниках [6, 7]. В табл. 1 приведены экспериментальные данные, которые позволяют определить теплоемкость при постоянном объеме и апробировать различные модели описания ее поведения в зависимости от температуры.

Таблица 1

Тепловые параметры уравнения состояния кристалла

Параметры	Название соединения				
	гексоген	тэн	тетрил	тритил	татб
μ , кг/кмоль	222,13	316,50	287,15	227,13	258,18
ρ_0 , кг/м ³	1806,0	1778,0	1731,0	1653,0	1937,0
C_P , кдж/кг·К	0,9707	1,6694	0,9046	1,1255	1,0054
C_V , кдж/кг·К	0,9017	1,5902	0,7805	0,9559	0,9995
T_0 , К	293,0	293,0	293,0	293,0	293,0
C_{so} , м/сек	2650	2320	2190	2160	1.4390
$\alpha \cdot 10^{-3}$, К ⁻¹	0,1908	0,2300	0,3200	0,3200	0,0995

Следуя работам А.И. Китайгородского [5], для описания поведения органического молекулярного кристалла разбиваем его термодинамические функции на межмолекулярные и внутри-

молекулярные. Межмолекулярная часть спектра состояла из шести колебаний на молекулу: три колебания – колебания центра тяжести молекулы, а три колебания – колебания углов Эйлера. В этом случае выражение для свободной энергии Гельмгольца может быть представлено в виде двух составляющих: межмолекулярной и внутримолекулярной

$$F = U_K + U_M + E_0 + 18RT \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \xi^2 \ln(1 - \exp(-\xi)) d\xi + RT \sum_{i=7}^{3N} \ln(1 - \exp(-x_i)), \quad (2)$$

где $x_i = h\omega_i/kT$, а ω_i – частоты нормальных колебаний атомов внутри молекул для гексогена, тротила, ТАТБ и ТЭНа приведены в работе [8, 9], U_K – межмолекулярная энергия взаимодействия, U_M – внутримолекулярной энергия взаимодействия, $\theta_D = h\omega_D/k$ – характеристическая температура Дебая, ω_D – частота Дебая.

Дифференцируя дважды выражение (2) по температуре при постоянном объеме, получим выражение для теплоёмкости при постоянном объёме в виде двух составляющих: первая относится к колебаниям внутри молекулы, вторая к колебаниям молекулы как целого

$$C_{VM} = R \sum_{i=7}^{3N} \frac{x_i^2 \exp(x_i)}{(\exp(x_i) - 1)^2}. \quad (3)$$

$$C_{VD} = C_V - C_{VM} = 6R \left(4D(x_D) - \frac{3x_D}{\exp(x_D) - 1} \right). \quad (4)$$

Здесь C_{VD} – составляющая теплоёмкости при постоянном объёме, зависящая от колебаний молекулы как целого (три колебания центра масс и три колебания углов Эйлера) и определяемая в приближении Дебая, а C_{VM} – составляющая теплоёмкости при постоянном объёме, зависящая от внутримолекулярных колебаний. Часть теплоёмкости C_{VM} называют внутримолекулярной. Предельные значения составляющих теплоёмкости, соответствующие высоким температурам для всех степеней свободы, равны $6R$ и $(3N - 6)R$ соответственно. Молекулярные кристаллы обычно имеют низкие характеристические температуры Дебая ($\sim 100 \div 300$ К) [10, 11], поэтому при комнатных температурах и выше часть теплоёмкости, определяемая колебаниями молекулы как целого, приближается к своему предельному значению $6R$.

Силовые постоянные для расчета спектров нормальных колебаний внутри молекулы были определены с помощью квантово-химических методов PM-3 и DFT, подробно описанных в работах [12, 13]. Для обеспечения достоверности получаемых в расчетах внутримолекулярных колебательных спектров конформации молекул определялись из данных рентгеноструктурного анализа соответствующих молекулярных кристаллов. ИК-спектры для гексогена, тротила, тетрила, ТАТБ и ТЭНа хорошо согласуются с известными экспериментальными данными [7] и в терминах характеристических температур колебаний $\theta = h\omega/k$ приведены в табл. 2–6.

Если на выводы, полученные по результатам работы [3], погрешности измерений C_p , α и C_s влияют слабо, то в данном случае при расчетах C_V этот факт обязательно необходимо учитывать. Это связано с тем, что величина теплоёмкости C_{VD} , описывающая колебания молекулы как целого, составляет всего 7–10 % от величины полной теплоёмкости C_V и может быть сравнима с суммарной погрешностью измерений C_p , α и C_s . Известные экспериментальные данные [11] позволяют определить значение C_V в некотором коридоре значений, приведенном в табл. 2. В силу того, что давления 10–20 ГПа, характерные для инициирования детонации в большинстве твердых ВВ, практически не влияют на внутримолекулярный колебательный спектр нитросоединения [10], для расчета части теплоёмкости, связанной с внутримолекулярными колебаниями, можно использовать колебательный спектр, полученный для одиночной молекулы. Значения полной безразмерной теплоёмкости при постоянном объёме C_V/R , безразмерных теплоёмкостей C_{VM}/R и C_{VD}/R для гексогена, ТЭНа, ТАТБ и тротила, определенных формулами (3) и (4) с использованием данных из табл. 2–6, приведены в табл. 7.

Таблица 2

Характеристические температуры колебаний молекулы тротила

№	θ, K	№	θ, K	№	θ, K	№	θ, K
1	0,0	17	413,062	33	1158,672	49	2232,412
2	0,0	18	465,708	34	1222,008	50	2274,799
3	0,0	19	483,160	35	1351,801	51	2286,280
4	0,0	20	501,677	36	1397,123	52	2308,539
5	0,0	21	533,115	37	1424,704	53	2322,610
6	0,0	22	638,377	38	1430,790	54	2546,126
7	27,537	23	694,159	39	1485,277	55	2575,434
8	41,345	24	764,415	40	1509,478	56	2760,434
9	50,261	25	803,607	41	1701,096	57	2763,196
10	86,668	26	910,970	42	1794,761	58	2770,750
11	101,720	27	961,874	43	1829,695	59	4292,011
12	154,022	28	967,342	44	1921,375	60	4302,255
13	208,262	29	1070,100	45	1955,560	61	4396,367
14	211,673	30	1073,956	46	1982,825	62	4419,632
15	226,998	31	1078,244	47	2033,615	63	4571,324
16	385,173	32	1103,811	48	2083,166		

Таблица 3

Характеристические температуры колебаний молекулы ТАТБ

№	θ, K	№	θ, K	№	θ, K	№	θ, K
1	0,0	20	575,070	39	1153,420	58	2368,536
2	0,0	21	588,307	40	1187,649	59	2400,707
3	0,0	22	715,985	41	1187,664	60	2400,722
4	0,0	23	715,999	42	1240,856	61	2564,715
5	0,0	24	790,730	43	1353,369	62	2564,902
6	0,0	25	795,133	44	1486,400	63	2574,729
7	40,069	26	795,162	45	1486,400	64	2608,483
8	40,079	27	798,874	46	1886,383	65	2672,178
9	40,083	28	849,462	47	1886,426	66	2672,207
10	114,856	29	849,591	48	1929,576	67	4790,034
11	114,913	30	870,569	49	1930,568	68	4798,983
12	114,926	31	891,604	50	1949,330	69	4799,055
13	305,724	32	892,194	51	1949,445	70	4862,520
14	434,968	33	922,854	52	2182,026	71	4862,563
15	434,974	34	922,926	53	2185,321	72	4868,837
16	444,616	35	961,644	54	2185,321		
17	444,672	36	1029,080	55	2213,650		
18	551,564	37	1029,684	56	2262,339		
19	551,575	38	1029,785	57	2262,368		

Таблица 4

Характеристические температуры колебаний молекулы гексогена

№	θ, K	№	θ, K	№	θ, K	№	θ, K
1	0,0	17	442,039	33	1137,810	49	1938,770
2	0,0	18	468,355	34	1284,034	50	1943,057
3	0,0	19	500,368	35	1306,954	51	1949,776
4	0,0	20	526,626	36	1333,600	52	2179,148
5	0,0	21	622,939	37	1369,311	53	2180,975
6	0,0	22	645,643	38	1386,476	54	2215,175
7	47,569	23	690,518	39	1446,085	55	2875,192
8	60,140	24	709,525	40	1541,261	56	2897,392
9	66,459	25	768,947	41	1549,893	57	2906,241
10	79,752	26	816,672	42	1579,763	58	4162,218
11	95,504	27	905,891	43	1652,105	59	4164,160
12	110,457	28	927,717	44	1688,449	60	4178,678

Окончание табл. 4

№	θ, K	№	θ, K	№	θ, K	№	θ, K
13	281,411	29	939,458	45	1711,455	61	4220,834
14	327,471	30	970,507	46	1782,359	62	4223,712
15	362,503	31	982,751	47	1839,666	63	4244,574
16	404,822	32	997,873	48	1860,341		

Таблица 5

Характеристические температуры колебаний молекулы тетрила

№	θ, K	№	θ, K	№	θ, K	№	θ, K
1	0,0	20	345,810	39	1077,730	58	2023,858
2	0,0	21	412,831	40	1098,900	59	2172,510
3	0,0	22	428,886	41	1121,745	60	2224,884
4	0,0	23	442,090	42	1173,551	61	2266,405
5	0,0	24	490,121	43	1248,389	62	2282,485
6	0,0	25	512,418	44	1387,854	63	2299,619
7	30,698	26	530,991	45	1402,507	64	2311,157
8	39,030	27	574,412	46	1413,886	65	2537,961
9	43,533	28	666,941	47	1439,344	66	2563,696
10	61,730	29	682,325	48	1465,681	67	2761,500
11	95,618	30	753,831	49	1507,668	68	2775,868
12	125,145	31	763,872	50	1607,209	69	2777,234
13	135,887	32	824,998	51	1714,776	70	2974,530
14	161,881	33	898,703	52	1804,292	71	4257,938
15	193,300	34	923,263	53	1869,680	72	4302,595
16	202,809	35	951,676	54	1907,167	73	4390,433
17	216,275	36	971,507	55	1944,706	74	4403,467
18	222,037	37	977,815	56	1952,422	75	4501,042
19	254,900	38	1074,631	57	1982,385		

Таблица 6

Характеристические температуры колебаний молекулы тэна

№	θ, K	№	θ, K	№	θ, K	№	θ, K
1	0,0	23	295,687	45	1135,773	67	1895,544
2	0,0	24	301,282	46	1135,773	68	2028,793
3	0,0	25	358,068	47	1157,823	69	2028,793
4	0,0	26	394,701	48	1234,733	70	2035,511
5	0,0	27	394,702	49	1330,823	71	2061,779
6	0,0	28	490,184	50	1330,825	72	2211,154
7	24,809	29	528,423	51	1379,322	73	2211,154
8	32,149	30	724,476	52	1384,431	74	2216,072
9	33,013	31	724,477	53	1384,431	75	2228,812
10	47,086	32	792,838	54	1415,548	76	2310,509
11	57,834	33	792,838	55	1456,054	77	2310,510
12	66,114	34	832,909	56	1541,352	78	2310,748
13	68,083	35	882,688	57	1699,176	79	2315,484
14	68,084	36	919,776	58	1699,178	80	4474,865
15	114,091	37	928,495	59	1755,385	81	4474,869
16	114,810	38	993,159	60	1756,148	82	4481,692
17	193,496	39	993,841	61	1756,148	83	4482,720
18	196,629	40	993,842	62	1773,277	84	4571,178
19	196,630	41	995,907	63	1776,397	85	4573,758
20	247,838	42	1009,723	64	1800,453	86	4580,997
21	247,839	43	1009,725	65	1820,869	87	4581,000
22	288,866	44	1132,256	66	1895,543		

Значения безразмерных теплоёмкостей при постоянном объёме

Параметры	Название соединения			
	гексоген	ТЭН	ТАТБ	тротил
C_V / R	28,14–29,48	38,42	30,60–31,8	27,25–30,66
C_{VM} / R	22,35	32,33	24,48	21,62
C_{VD} / R	5,79–7,13	6,09	6,12	5,63–9,04

Как следует из результатов расчетов, приведенных в табл. 7, значение $C_{VD} / R = 6$ попадает в коридор, определяющий значение теплоёмкости, зависящей от колебаний молекулы как целого. Следовательно, разбиение термодинамического потенциала на внутримолекулярную и межмолекулярную части является оправданным и может быть использовано при расчетах теплоёмкости молекулярных кристаллов. Учитывая тот факт, что характеристические температуры Дебая молекулярных кристаллов малы, можем записать выражение, определяющее зависимость теплоёмкости при постоянном объёме от температуры в виде

$$C_V = 6R + R \sum_{i=7}^{3N} \frac{x_i^2 \exp(x_i)}{(\exp(x_i) - 1)^2}. \quad (5)$$

Другой подход к определению зависимости теплоёмкости при постоянном объёме от температуры был предложен в работе В.Г. Щетинина [11]. В данной работе для ряда кристаллов нитросоединений было показано, что зависимость $C_V(T)$ хорошо описывается эмпирическим выражением вида

$$C_V / C_{VH} = 1 - (1 - C_V^0 / C_{VH}) \exp[-(T - T_c) / T_c], \quad (6)$$

где $C_{VH} = 3NR$, C_V^0 – значение теплоёмкости при начальной температуре, T_c – параметр, определенный в работе [11] для ряда органических соединений.

Объединение результатов расчетов, проведенных по формулам (5) и (6), позволяет получить выражение универсальной кривой, описывающей зависимость безразмерной теплоёмкости при постоянном объёме от температуры, в следующей форме

$$\frac{C_V}{C_V^0} = \frac{C_{VH}}{C_V^0} - \left(\frac{C_{VH}}{C_V^0} - 1 \right) \exp[-(T - T_0) / T_*], \quad (7)$$

где T_* – параметр. В табл. 8 приведены данные расчетов относительных теплоемкостей для гексогена, ТЭНа, ТАТБ, тротила, проведенных по формуле (5) – столбец таблицы с номером 1, формуле (7) – столбец с номером 2 и по формуле (6) – столбец номер 3. Как следует из данных табл. 8 значения относительной теплоемкости при постоянном объёме, рассчитанные по формуле (7) с параметром T_* равным 600 К, находятся в коридоре, ограниченным снизу значениями относительной теплоемкости при постоянном объёме, рассчитанными по формуле (5), и ограниченным сверху значениями относительной теплоемкости при постоянном объёме, рассчитанными по формуле (6).

Выводы

Как наглядно следует из табл. 6, 7, 8, по результатам работы можно делать следующие выводы:

1. Приближение, принятое в работах А.И. Китайгородского, может быть использовано при расчетах зависимости теплоемкости при постоянном объёме от температуры.
2. Для гексогена, ТЭНа, тротила, тетрила и ТАТБ значения относительной теплоемкости при постоянном объёме могут быть описаны универсальной кривой (7) с одним параметром T_* , равным 600 К.

Авторы выражают свою благодарность профессору А.В. Белику за полезные обсуждения и интерес к работе.

Таблица 8
Относительные теплоёмкости при постоянном объеме для гексогена, ТЭНа, ТАТБ, тротила

Температура T, К	Гексоген			ТЭН			ТАТБ			Тротил		
	1	2	3	1	2	3	1	2	3	1	2	3
293	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
333	1,0887	1,0799	1,0861	1,0866	1,0816	1,0733	1,0979	1,0873	1,0933	1,0838	1,0842	1,0857
373	1,1713	1,1546	1,1663	1,1686	1,1579	1,1529	1,1888	1,1690	1,1802	1,1634	1,1629	1,1683
413	1,2474	1,2246	1,2409	1,2450	1,2292	1,2270	1,2728	1,2454	1,2611	1,2384	1,2366	1,2454
453	1,3171	1,2900	1,3103	1,3154	1,2960	1,2960	1,3503	1,3168	1,3364	1,3086	1,3055	1,3172
493	1,3807	1,3512	1,3749	1,3799	1,3585	1,3694	1,4214	1,3837	1,4065	1,3738	1,3700	1,3842
533	1,4388	1,4084	1,4349	1,4387	1,4169	1,4203	1,4866	1,4463	1,4718	1,4343	1,4303	1,4466
573	1,4918	1,4620	1,4908	1,4921	1,4716	1,4762	1,5462	1,5048	1,5326	1,4902	1,4867	1,5048
613	1,5403	1,5121	1,5429	1,5407	1,5228	1,5282	1,6007	1,5595	1,5892	1,5418	1,5395	1,5590
653	1,5846	1,5590	1,5913	1,5850	1,5706	1,5767	1,6505	1,6107	1,6419	1,5894	1,5889	1,6096
693	1,6253	1,6028	1,6363	1,6254	1,6154	1,6218	1,6961	1,6586	1,6910	1,6332	1,6351	1,6567
733	1,6628	1,6439	1,6782	1,6624	1,6572	1,6639	1,7378	1,7035	1,7366	1,6737	1,6783	1,7007
773	1,6972	1,6822	1,7172	1,6963	1,6964	1,7031	1,7761	1,7454	1,7792	1,7111	1,7187	1,7416
813	1,7290	1,7181	1,7535	1,7274	1,7331	1,7396	1,8114	1,7846	1,8188	1,7456	1,7565	1,7798
853	1,7584	1,7517	1,7872	1,7561	1,7674	1,7736	1,8439	1,8213	1,8556	1,7776	1,7919	1,8154
893	1,7857	1,7831	1,8186	1,7826	1,7994	1,8053	1,8740	1,8556	1,8899	1,8071	1,8250	1,8486
933	1,8109	1,8125	1,8479	1,8071	1,8294	1,8348	1,9018	1,8877	1,9219	1,8346	1,8560	1,8795
973	1,8343	1,8400	1,8750	1,8298	1,8575	1,8623	1,9277	1,9178	1,9517	1,8600	1,8850	1,9084
993	1,8454	1,8531	1,8878	1,8405	1,8708	1,8754	1,9313	1,9321	1,9658	1,8720	1,8987	1,9221

Литература

1. Жарков, В.Н. Уравнения состояния при высоких температурах и давлениях / В.Н. Жарков, В.А. Калинин. – М.: Наука, 1968. – 311 с.
2. Куропатенко, В.Ф. Уравнения состояния в математических моделях механики и физики / В.Ф. Куропатенко // Математическое моделирование. – 1992. – Т. 4, № 12. – С. 112–136.
3. Ковалев, Ю.М. Анализ некоторых приближений для описания тепловой части уравнений состояния молекулярных кристаллов / Ю.М. Ковалев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математика. Механика. Физика». – 2017. – Т. 9, № 1. – С. 49–56.
4. Жирифалько, Л. Статистическая физика твердого тела / Л. Жирифалько. – М.: Мир, 1975. – 382 с.
5. Китайгородский, А.И. Молекулярные кристаллы / А.И. Китайгородский. – М.: Наука, 1971. – 424 с.
6. Dobratz, V.M. LLNL Explosives Handbook. Properties of Chemical Explosives and Explosive Simulants. Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL-52997 / V.M. Dobratz, P.C. Crawford. – 1985.
7. Gibbs, T.R. Last explosive property data. Los Alamos series on dynamic material properties / T.R. Gibbs, A. Popolato. – Berkeley, Los Angeles, London: University of California Press, 1980.
8. Ковалев, Ю.М. Математическое моделирование тепловой составляющей уравнения состояния молекулярных кристаллов / Ю.М. Ковалев // Вестник Южно-Уральского государственного университета. Серия «Математическое моделирование и программирование». – 2013. – Т. 6, № 1. – С. 34–42.
9. Ковалев, Ю.М. Определение тепловой составляющей уравнения состояния молекулярных кристаллов / Ю.М. Ковалев, А.В. Белик // Вестник Челябинского государственного университета. – 2013. – № 9(300). – С. 5–10.
10. Miller, P.J. Effect of Pressure on the Vibration Spectra of Liquid Nitromethane / P.J. Miller, S. Block, G.J. Piermarini // J. of Physical Chemistry. – 1989. – Vol. 93, no. 1. – P. 462–466.
11. Щетинин, В.Г. Расчет теплоемкости органических веществ в ударных и детонационных волнах / В.Г. Щетинин // Химическая физика. – 1999. – Т. 18, № 5. – С. 90–95.
12. Кларк, Т. Компьютерная химия / Т. Кларк. – М.: Мир, 1990. – 384 с.
13. Степанов, Н.Ф. Квантовая химия сегодня / Н.Ф. Степанов, Ю.В. Новаковская // Российский химический журнал. – 2007. – Т. LI, № 5. – С. 5–17.

Поступила в редакцию 28 сентября 2017 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2017, vol. 9, no. 4, pp. 43–51*

DOI: 10.14529/mmph170406

SIMULATION OF THE THERMAL CONSTITUENT OF MOLECULAR CRYSTALS STATE EQUATIONS

Yu.M. Kovalev, O.A. Shershneva

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: kovalevym@susu.ru

The analysis of existing approximations to describe the dependence of the heat capacity at a constant volume on the temperature of the molecular crystal has shown that the given approximations do not adequately describe the dependence of the heat capacity at a constant volume on the temperature. Therefore, in this paper for the heat capacity at a constant volume of a molecular crystal such approximation is given which makes it possible to describe both the low frequency and the high frequency parts of the vibrational spectra of molecular crystals and to obtain the temperature dependence of the heat capacity at a constant volume for molecular crystals of nitro compounds which is in line with the known dependencies. The knowledge of the dependence of the heat capacity at a constant volume on the temperature of a molecular crystal is of a great importance at the developing of the equations of state which are the

closing relations of mathematical models rendering the propagation of shock waves, initiation of detonation in molecular crystals, etc. The separation of the frequencies of normal vibrations into intramolecular vibrational frequencies and the vibrations of the molecule as a whole (three vibrations of the center of gravity of the molecule and three vibrations of Euler angles) made it possible to use methods of quantum chemistry to determine the effect of intramolecular vibrations on the specific heat capacity at a constant volume. The analysis of the proposed approximation carried in the paper has shown that for molecular crystals of cyclonite, penthrite, tritol, tetryl and triaminobtrinitrobenzene the values of the relative heat capacity at a constant volume can be described by a universal curve with one parameter which is equal to 600 K.

Keywords: equation of state; molecular crystal; Helmholtz energy; Planck's constant; Boltzmann's constant; Debye approximation; Einstein's approximation.

References

1. Zharkov V.N., Kalinin V.A. *Uravneniya sostoyaniya pri vysokikh temperaturakh i davleniyakh* (Equations of state at high temperature and pressure). Moscow, Nauka Publ., 1968, 311 p. (in Russ.).
2. Kuropatenko V.F. *Uravneniya sostoyaniya v matematicheskikh modelyakh mekhaniki i fiziki* (Equations of state in mathematical models of mechanics and physics). *Matematicheskoe modelirovanie*, 1992, Vol. 4, no. 12, pp. 112–136. (in Russ.).
3. Kovalev Yu.M. Analysis of Some Approximation for the Description of Thermal Side of the Equation States of Molecular Crystals. *Bulletin of the South Ural State University. Series of "Mathematics. Mechanics. Physics"*, 2017, Vol. 9, no 1, pp. 49–56. DOI: 10.14529/mmph170106
4. Zhirifal'ko L. *Statisticheskaya fizika tverdogo tela* (Statistical physics of solid body). Moscow, Mir Publ., 1975, 382 p. (in Russ.).
5. Kitaygorodskiy A.I. *Molekulyarnye kristally* (Molecular crystals). Moscow, Nauka Publ., 1971, 424 p. (in Russ.).
6. Dobratz B.M., Crawford P.C. *LLNL Explosives Handbook. Properties of Chemical Explosives and Explosive Simulants*. Lawrence Livermore National Laboratory Report UCRL-52997, 1985.
7. Gibbs T.R., Popolato A. *Last explosive property data. Los Alamos series on dynamic material properties*. Berkeley, Los Angeles, London, University of California Press, 1980.
8. Kovalev Yu.M. Mathematical Modelling of the Thermal Component of the Equation of State of Molecular Crystals. *Bulletin of the South Ural State University. Series Mathematical Modelling, Programming & Computer Software*, 2013, Vol. 6, no. 1, pp. 34–42.
9. Kovalev Yu.M., Belik A.V. *Vestnik Chelyabinskogo gosudarstvennogo universiteta*, 2013, no. 9(300), pp. 5–10. (in Russ.).
10. Miller P.J., Block S., Piermarini G.J. Effect of Pressure on the Vibration Spectra of Liquid Nitromethane. *J. of Physical Chemistry*, 1989, Vol. 93, no. 1, pp. 462–466. DOI: 10.1021/j100338a088
11. Shchetinin V.G. *Khimicheskaya fizika*, 1999, Vol. 18, no. 5, pp. 90–95.
12. Klark T. *Komp'yuternaya khimiya* (Computer chemistry). Moscow, Mir Publ., 1990, 384 p. (in Russ.).
13. Stepanov N.F., Novakovskaya Yu.V. *Kvantovaya khimiya segodnya* (Quantum Chemistry Today). *Rossiyskiy khimicheskiy zhurnal*, 2007, Vol. LI, no. 5, pp. 5–17. (in Russ.).

Received September 28, 2017

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ О СХОДЯЩЕЙСЯ УДАРНОЙ ВОЛНЕ В ГАЗЕ В ОДНОМЕРНОМ СЛУЧАЕ

В.Ф. Куропатенко^{1,2}, Ф.Г. Магазов², Е.С. Шестаковская²

¹ Российский федеральный ядерный центр – Всероссийский научно-исследовательский институт технической физики им. академика Е.И. Забабахина, г. Снежинск, Российская Федерация

² Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: leshest@list.ru

Построено аналитическое решение задачи о сходящейся ударной волне в сосуде с непроницаемой стенкой, описывающее случаи плоской, цилиндрической и сферической симметрии. На границе сосуда задана отрицательная скорость, а скорость холодного идеального газа равна нулю. В начальный момент времени из этой точки начнет распространяться ударная волна к центру симметрии. Граница сосуда будет двигаться по определенному закону, согласованному с движением ударной волны. В эйлеровых переменных она движется, но в лагранжевых переменных её траектория является вертикальной линией. Получены уравнения, определяющие структуру течения газа между фронтом ударной волны и границей как функции времени и лагранжевой координаты, а также зависимость энтропии от скорости ударной волны. Для всех случаев симметрии найдены показатели автомодельности и соответствующие им значения безразмерных координат для широкого диапазона показателей адиабаты. Задача решена в лагранжевых координатах и принципиально отличается от ранее известных постановок задачи о сжатии автомодельной ударной волны к центру симметрии и её отражении от центра, которые построены для бесконечной области в эйлеровых координатах.

Ключевые слова: ударная волна; плоская симметрия; цилиндрическая симметрия; сферическая симметрия; идеальный газ; аналитическое решение.

Введение

Развитие теории размерности и подобия величин механики сплошной среды позволило в разные годы XX века получить автомодельные решения задачи о фокусировке ударной волны в бесконечном идеальном газе [1–9]. Задачи, имеющие аналитическое решение, еще называют «эталонными» задачами, так как они используются для верификации математических моделей динамических процессов механики сплошных сред. Однако реальные тела имеют конечные размеры. В данной работе рассмотрена задача о сходящейся ударной волне в сосуде с непроницаемой стенкой, имеющая точное аналитическое решение, описывающее три типа одномерных движений – плоские, цилиндрически и сферически симметричные движения.

Постановка задачи

Рассматривается сосуд с непроницаемой стенкой, в котором находится газ массой M_0 и начальными при $t = t_0$ параметрами газа $\rho_0 = \text{const}$, $U_0 = 0$, $P_0 = 0$, $E_0 = 0$, где ρ – плотность, U – скорость, P – давление, E – удельная внутренняя энергия. Лагранжевой координатой является масса M . Второй независимой переменной является время t . В точке t_0 , M_0 задана скорость $U_1 < 0$. Таким образом, в этой точке задан сильный разрыв, который при $t > t_0$ распространяется к центру симметрии и в момент t_f фокусируется в точку $M = 0$. Граница сосуда при $t > t_0$ движется в переменных r, t , но в переменных M, t её траектория является вертикальной линией. Вообще говоря, все траектории частиц являются вертикальными линиями, вдоль которых сохраняется то значение энтропии, которое возникло на ударной волне. Параметры газа между ударной волной и границей определяются системой законов сохранения Эйлера–Гельмгольца. Уравнение состояния используется в двух формах:

$$P = (\gamma - 1)\rho E, \quad P = F(s)\rho^\gamma, \quad (1)$$

где $F(s)$ – функция от энтропии.

Ударная волна

Законы сохранения на ударной волне (УВ) при $U_0 = 0, P_0 = 0, E_0 = 0, F_0 = 0$ имеют вид [10]:

$$\rho_w(D - U_w) - \rho_0 D = 0, \quad (2)$$

$$\rho_0 D U_w - P_w = 0, \quad (3)$$

$$\rho_0 D \left(E_w + \frac{1}{2} U_w^2 \right) - P_w U_w = 0. \quad (4)$$

Индексом «w» обозначены величины на ударной волне, D – скорость ударной волны. Преобразуем эти уравнения к виду, содержащему зависимости U_w, ρ_w, F_w, P_w от скорости ударной волны в лагранжевых координатах. Лагранжева координата M_w ударной волны в одномерном случае связана с её эйлеровой координатой r_w уравнением

$$M_w = \frac{s_\mu}{\mu} \rho_0 r_w^\mu, \quad (5)$$

$$\text{где } \mu = \begin{cases} 1, \text{ плоская симметрия} \\ 2, \text{ цилиндрическая симметрия,} \\ 3, \text{ сферическая симметрия} \end{cases} \quad s_\mu = \begin{cases} 1, \text{ при } \mu = 1 \\ 2\pi, \text{ при } \mu = 2. \\ 4\pi, \text{ при } \mu = 3 \end{cases}$$

Скорость ударной волны в лагранжевых координатах есть изменение M_w со временем

$$W = \frac{dM_w}{dt} = s_\mu \rho_0 r_w^{\mu-1} D. \quad (6)$$

Заменим эйлерову координату ударной волны её лагранжевой координатой. Для этого выразим r_w из (5) и подставим в (6)

$$W = (\mu M_w)^{(\mu-1)/\mu} (s_\mu \rho_0)^{1/\mu} D. \quad (7)$$

Выразив в (7) D через W и M_w и подставив в (2)–(4), получим с помощью (1) величины на ударной волне, содержащие W и M_w :

$$\rho_w = \frac{\gamma + 1}{\gamma - 1} \rho_0; \quad (8)$$

$$U_w = \frac{2}{\gamma + 1} (s_\mu \rho_0)^{-1/\mu} (\mu M_w)^{(1-\mu)/\mu} W; \quad (9)$$

$$P_w = \frac{2}{\gamma + 1} \rho_0^{(\mu-2)/\mu} s_\mu^{-2/\mu} (\mu M_w)^{2(1-\mu)/\mu} W^2. \quad (10)$$

Из (1), (8) и (10) следует выражение для F_w

$$F_w = \left[\frac{2}{\gamma + 1} \left(\frac{\gamma - 1}{\gamma + 1} \right)^\gamma \rho_0^{-(\gamma - (\mu - 2)/\mu)} s_\mu^{-2/\mu} \right] (\mu M_w)^{2(1-\mu)/\mu} W^2. \quad (11)$$

В точке $t = t_0$ $M_w = M_0, U_w = U_{w0}, P_w = P_{w0}, F_w = F_{w0}$ выражения (9)–(11) принимают вид:

$$U_w = U_0 \left(\frac{W}{W_0} \right) \left(\frac{M_0}{M_w} \right)^{(\mu-1)/\mu}, \quad P_w = P_0 \left(\frac{W}{W_0} \right)^2 \left(\frac{M_0}{M_w} \right)^{2(\mu-1)/\mu}, \quad F_w = F_0 \left(\frac{W}{W_0} \right)^2 \left(\frac{M_0}{M_w} \right)^{2(\mu-1)/\mu}. \quad (12)$$

По аналогии с [11, 12] зададим траекторию ударной волны в виде

$$M_w = M_0 \varphi(t)^n, \quad (13)$$

где $\varphi = (t_f - t) / (t_f - t_0)$. Продифференцировав M_w по t , получим выражение для скорости ударной волны в лагранжевых координатах

$$W = W_0 \varphi^{n-1}, \quad (14)$$

где

$$W_0 = -\frac{M_0 n}{t_f - t_0}. \quad (15)$$

Исключив в (13) и (14) функцию от времени, получим зависимость W от M_w

$$\frac{W}{W_0} = \left(\frac{M_w}{M_0}\right)^{(n-1)/n}. \quad (16)$$

С помощью соотношения (16) исключим W в (12):

$$U_w = U_{w0} \left(\frac{M_w}{M_0}\right)^{(n-\mu)/\mu n}, \quad P_w = P_{w0} \left(\frac{M_w}{M_0}\right)^{2(n-\mu)/\mu n}, \quad F_w = F_{w0} \left(\frac{M_w}{M_0}\right)^{2(n-\mu)/\mu n}. \quad (17)$$

Поскольку M_w и t связаны уравнением траектории ударной волны, то из (13) и (17) следуют зависимости U_w , P_w , F_w от t :

$$U_w = U_{w0} \varphi^{(n-\mu)/\mu}, \quad P_w = P_{w0} \varphi^{2(n-\mu)/\mu}, \quad F_w = F_{w0} \varphi^{2(n-\mu)/\mu}. \quad (18)$$

Величина F_w вдоль траектории частицы с координатой M_w постоянна. Следовательно, зависимость энтропии от массы между ударной волной и границей газа имеет вид

$$F = F_{w0} \left(\frac{M}{M_0}\right)^{2(n-\mu)/\mu n}. \quad (19)$$

Из (5) следует зависимость r_w от M_w

$$r_w = r_0 \left(\frac{M_w}{M_0}\right)^{1/\mu}. \quad (20)$$

Выбор траектории УВ в форме (13) определяет характер зависимостей W и D от M_w . При $n < 1$ $W \rightarrow -\infty$, если $M_w \rightarrow 0$, при $n = 1$ $W = W_0 = \text{const}$ и при $n > 1$ уменьшается при уменьшении M_w . Эти типы зависимостей приведены на рис. 1. Зависимость D от M_w следует из (7) и (20)

$$\frac{D}{D_0} = \left(\frac{M_w}{M_0}\right)^{(n-\mu)/\mu n}. \quad (21)$$

Из (21) следует, что при $n < \mu$ $D \rightarrow -\infty$, если $M_w \rightarrow 0$, при $n = \mu$ $D = D_0 = \text{const}$ и при $n > \mu$ $D \rightarrow 0$ при уменьшении M_w (рис. 2). Фактическая реализация одного из этих режимов возможна лишь при организации соответствующего течения газа между фронтом УВ и наружной границей.

Течение газа за ударной волной

Параметры адиабатического течения за ударной волной определяются уравнениями, траектории, сохранения массы и движения:

$$\left(\frac{\partial r}{\partial t}\right)_M - U = 0, \quad (22)$$

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_M + s_\mu \rho^2 \frac{\partial (r^{\mu-1} U)}{\partial M} = 0, \quad (23)$$

$$\left(\frac{\partial U}{\partial t}\right)_M + s_\mu r^{\mu-1} \frac{\partial (F \rho^\gamma)}{\partial M} = 0. \quad (24)$$

Эти уравнения содержат три искоемых функции r , ρ и U . Величина F определяется на ударной волне и зависит только от M (17).

Перейдём в (22)–(24) к новым искомым функциям

$$R = r^\mu, \quad C = r^{\mu-1}U. \quad (25)$$

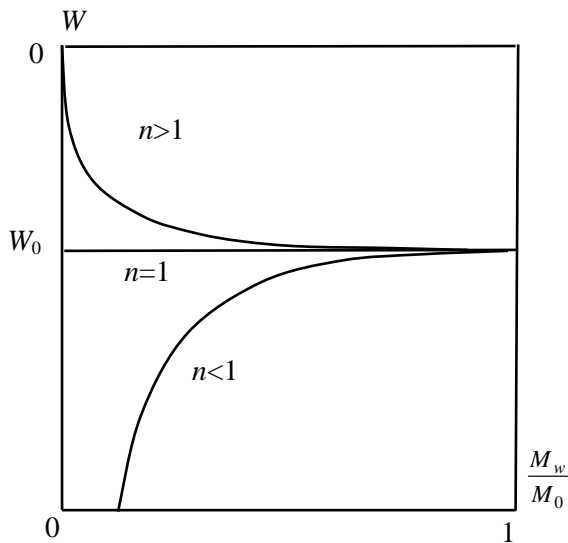


Рис. 1. Схематическое изображение возможных зависимостей $W(M_w)$

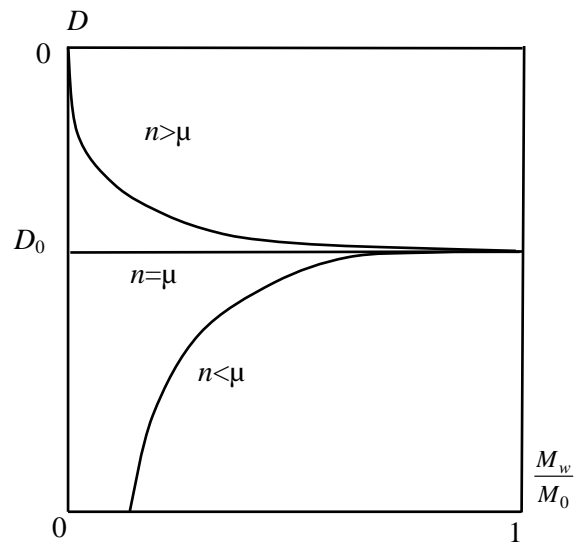


Рис. 2. Схематическое изображение возможных зависимостей $D(M_w)$

После перехода к функциям R и C уравнения (22)–(24) примут вид:

$$\left(\frac{\partial R}{\partial t}\right)_M - \mu C = 0, \quad (26)$$

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_M + s_\mu \rho^2 \frac{\partial C}{\partial M} = 0, \quad (27)$$

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_M + s_\mu R^{2(\mu-1)/\mu} \frac{\partial(F\rho^\gamma)}{\partial M} - 2C^2 R^{-1} = 0. \quad (28)$$

Из (17), (19) и (25) следуют зависимости R_w и C_w от M_w :

$$R_w = R_0 \frac{M_w}{M_0}, \quad C_w = C_0 \left(\frac{M_w}{M_0}\right)^{(n-1)/n}. \quad (29)$$

Уравнения (26)–(28) являются основными для отыскания R , C и ρ в области интегрирования $M_w \leq M \leq M_0$, $t_0 \leq t \leq t_f$.

Перейдём от переменных t, M к переменным $t, \xi(t, M)$. С помощью уравнений для производных

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_M = \left(\frac{\partial}{\partial t}\right)_\xi + \left(\frac{\partial}{\partial \xi}\right)_t \left(\frac{\partial \xi}{\partial t}\right)_M, \quad \left(\frac{\partial}{\partial M}\right)_t = \left(\frac{\partial}{\partial \xi}\right)_t \left(\frac{\partial \xi}{\partial M}\right)_t$$

преобразуем уравнения (26)–(28)

$$\left(\frac{\partial R}{\partial t}\right)_\xi + \left(\frac{\partial R}{\partial \xi}\right)_t \left(\frac{\partial \xi}{\partial t}\right)_M - \mu C = 0, \quad (30)$$

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial t}\right)_\xi + \left(\frac{\partial \rho}{\partial \xi}\right)_t \left(\frac{\partial \xi}{\partial t}\right)_M + s_\mu \rho^2 \left(\frac{\partial C}{\partial \xi}\right)_t \left(\frac{\partial \xi}{\partial M}\right)_t = 0, \quad (31)$$

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t}\right)_\xi + \left(\frac{\partial C}{\partial \xi}\right)_t \left(\frac{\partial \xi}{\partial t}\right)_M - \frac{(\mu-1)C^2}{R} + s_\mu R^{2(\mu-1)/\mu} \left[\rho^\gamma \left(\frac{\partial F}{\partial \xi}\right)_t \left(\frac{\partial \xi}{\partial M}\right)_t + \gamma F \rho^{\gamma-1} \left(\frac{\partial \rho}{\partial \xi}\right)_t \left(\frac{\partial \xi}{\partial M}\right)_t \right] = 0. \quad (32)$$

Зависимость $\xi(t, M)$ зададим так, чтобы на ударной волне было $\xi = 1$. Из (13) следует, что проще всего взять такую зависимость в виде

$$\xi = \frac{M}{M_0} \varphi^{-n}. \quad (33)$$

Для разделения переменных представим R , ρ и C в виде произведений функций от времени на функции от ξ

$$R = \alpha_R(t)T(\xi) \quad \rho = \alpha_\rho(t)\delta(\xi) \quad C = \alpha_C(t)Z(\xi). \quad (34)$$

Поскольку на ударной волне $\xi = 1$, то значения $T_1 = T(1)$, $\delta_1 = \delta(1)$, $Z_1 = Z(1)$ должны быть постоянными. Из (29) и (33) следует зависимость $R_w(t)$

$$R_w = R_0 \varphi^n. \quad (35)$$

Сравнив эту зависимость с (34) на ударной волне, получим выражение для α_R

$$\alpha_R(t) = R_0 \varphi^n T_1^{-1}. \quad (36)$$

Аналогично для α_ρ и α_C получаем соотношения

$$\alpha_\rho = \rho_0 \left(\frac{\gamma+1}{\gamma-1} \right) \delta_1^{-1}, \quad \alpha_C(t) = C_0 \varphi^{n-1} Z_1^{-1}. \quad (37)$$

Подставив (34)–(37) в (30)–(32) и воспользовавшись (15), получим три уравнения для T , δ и Z :

$$\xi T' = A_1, \quad (38)$$

$$\delta_1 B_1 Z' - \xi Z_1 \delta' = 0, \quad (39)$$

$$-\frac{\xi}{Z_1} Z' + \frac{C_1 \gamma \xi}{\delta_1} \delta' = C_2, \quad (40)$$

где штрих означает дифференцирование по ξ . Коэффициенты уравнений (38)–(40) A_1, B_1, C_1, C_2 с помощью (5), (6), (12) и (23) преобразуются к виду

$$A_1 = T - \frac{2ZT_1}{(\gamma+1)Z_1}, \quad B_1 = \frac{2\delta^2}{(\gamma-1)\delta_1^2}, \quad C_1 = \frac{\delta^{\gamma-1} T^{2(\mu-1)/\mu} \xi^{-((\mu-2)n+2\mu)/\mu n}}{\delta_1^{\gamma-1} T_1^{2(\mu-1)/\mu}}, \quad (41)$$

$$C_2 = \frac{2(\mu-1)Z^2 T_1}{\mu(\gamma+1)Z_1^2 T} - \frac{(n-1)Z}{nZ_1} - C_1 \frac{2(n-\mu)\delta}{\mu n \delta_1}.$$

Уравнения (38)–(40) образуют относительно T' , δ' , Z' систему линейных неоднородных уравнений. Определитель системы равен

$$\Delta = B_1 C_1 \gamma \xi - \xi^2.$$

Если $\Delta \neq 0$, то решение системы (37)–(39) существует и имеет вид

$$T' = \frac{A_1}{\xi}, \quad \delta' = \frac{B_1 C_2 \delta_1}{\Delta}, \quad Z' = \frac{\xi C_2 Z_1}{\Delta}. \quad (42)$$

Интегрирование системы уравнений (42) начинается в точке $\xi = 1$ (на ударной волне). Расчёты показывают, что существует промежуток значений n таких, что определитель в ноль не обращается. При некотором значении n_* определитель обращается в ноль при $\xi = \xi_*$. В этой точке решение существует, если C_2 тоже обращается в ноль. Каждому значению γ соответствует одно значение n_* (таблицу). В этой же таблице приведены значения ξ_* , при которых одновременно $\Delta(\xi_*) = 0$, $C_2(\xi_*) = 0$.

В лагранжевых координатах построено аналитическое решение одномерной задачи о сходящейся ударной волне для трех типов симметрии, и для широкого диапазона показателей адиабаты идеального газа найдены соответствующие показатели автомодельности.

Значения n_* и ξ_* , соответствующие различным значениям показателя адиабаты γ

μ	γ	1,1	1,2	4/3	1,4	5/3
1	n_*	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
	ξ_*	4,691312	3,464715	2,828906	2,646222	2,236450
2	n_*	1,770501	1,722331	1,684516	1,670651	1,631252
	ξ_*	6,768540	4,873946	3,896265	3,616019	2,990161
3	n_*	2,387916	2,271434	2,183068	2,151532	2,065135
	ξ_*	7,959997	5,717071	4,559431	4,227062	3,481885

Статья выполнена при поддержке Правительства РФ (Постановление № 211 от 16.03.2013 г.), соглашение № 02.A03.21.0011.

Литература

1. Guderley, G. Starke kugelige und zylindrische Verdichtungsstöße in der Nahe des Kugelmittelpunktes bzw. der Zylinderachse / G. Guderley // Luftfahrtforschung. – 1942. – Т. 19, № 9. – С. 302–312.
2. Седов, Л.И. О неустановившихся движениях сжимаемой жидкости / Л.И. Седов // Доклады Академии наук СССР. – 1945. – Т. 47, № 2. – С. 94–96.
3. Станюкович, К.П. Автомодельные решения уравнений гидромеханики, обладающих центральной симметрией / К.П. Станюкович // Доклады Академии наук СССР. – 1945. – Т. 48, № 5. – С. 331–333.
4. Брушлинский, К.В. Об автомодельных решениях некоторых задач газовой динамики / К.В. Брушлинский, Я.М. Каждан // Успехи математических наук. – 1963. – Т. 18, № 2. – С. 3–23.
5. Седов, Л.И. Методы подобия и размерности в механике / Л.И. Седов. – Москва: Гостехиздат, 1954. – 328 с.
6. Сидоров, А.Ф. Процессы безударного конического сжатия и разлета газа / А.Ф. Сидоров, О.Б. Хайруллина // Прикладная математика и механика. – 1994. – Т. 58, № 4. – С. 81–92.
7. Сидоров, А.Ф. Об оптимальном безударном сжатии газовых слоев / А.Ф. Сидоров // Доклады Академии наук СССР. – 1990. – Т. 313, № 2. – С. 283–287.
8. Крайко, А.Н. Сферически и цилиндрически симметричное нестационарное сжатие идеального газа / А.Н. Крайко // VII Забабахинские научные чтения, Снежинск, 8–12 сентября 2003. <http://www.vniitf.ru/rig/konfer/7zst/reports/s6/6-1.pdf>
9. Крайко, А.Н. Быстрое цилиндрически и сферически симметричное сильное сжатие идеального газа / А.Н. Крайко // Прикладная математика и механика. – 2007. – Т. 71, № 5. – С. 744–760.
10. Куропатенко, В.Ф. Модели механики сплошных сред / В.Ф. Куропатенко. – Челябинск: Челябинский государственный университет, 2007. – 302 с.
11. Куропатенко, В.Ф. Динамическое сжатие холодного газового шара / В.Ф. Куропатенко, Е.С. Шестаковская, М.Н. Якимова // Доклады академии наук. – 2015. – Т. 461, № 5. – С. 530–532.
12. Kuropatenko, V.F. Analytical solution of the problem of a shock wave in the collapsing gas in Lagrangian coordinates. / V.F. Kuropatenko, E.S. Shestakovskaya // AIP Conference Proceedings. – 2016. – Vol. 1770, Issue 1. – P. 030069.

Поступила в редакцию 18 сентября 2017 г.

ANALYTICAL SOLUTION OF THE PROBLEM OF A CONVERGENT SHOCK
IN GAS FOR ONE-DIMENSIONAL CASEV.F. Kuropatenko^{1,2}, F.G. Magazov², E.S. Shestakovskaya²¹ Russian Federal Nuclear Center – Zababakhin All-Russian Scientific Research Institute of Technical Physics, Snezhinsk, Russian Federation² South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: leshest@list.ru

The analytical solution of the problem of a convergent shock in the vessel with an impermeable wall is constructed for the cases of planar, cylindrical and spherical symmetry. The negative velocity is set at the vessel boundary. The velocity of cold ideal gas is zero. At the initial time the shock spreads from this point into the center of symmetry. The boundary moves under the particular law which conforms to the movement of the shock. In Euler variables it moves but in Lagrange variables its trajectory is a vertical line. Equations that determine the structure of the gas flow between the shock front and the boundary as a function of time and the Lagrange coordinate as well as the dependence of the entropy on the shock wave velocity are obtained. Self-similar coefficients and corresponding critical values of self-similar coordinates were found for a wide range of adiabatic index. Thus, the problem is solved for Lagrange coordinates. It is fundamentally different from previously known formulations of the problem of the self-convergence of the self-similar shock to the center of symmetry and its reflection from the center which has been constructed for the infinite area in Euler coordinates.

Keywords: shock wave; planar symmetry; cylindrical symmetry; spherical symmetry; ideal gas; analytical solution.

References

1. Guderley G. *Starke kugelige und zylindrische Verdichtungsstöße in der Nahe des Kugelmittelpunktes bzw. der Zylinderachse*. Luftfahrtforschung, 1942, Vol. 19, no. 9, pp. 302–312.
2. Sedov L.I. *Doklady Akademii nauk SSSR*, 1945, Vol. 47, no. 2, pp. 94–96. (in Russ.).
3. Stanyukovich K.P. *Doklady Akademii nauk SSSR*, 1945, Vol. 48, no. 5, pp. 331–333. (in Russ.).
4. Brushlinskiy K.V., Kazhdan Ya.M. *Russian Mathematical Surveys*, 1963, Vol. 18, no. 2, pp. 1–22. DOI: 10.1070/RM1963v018n02ABEH001133
5. Sedov L.I. *Metody podobiya i razmernosti v mekhanike*. Moscow, Gostekhizdat Publ., 1954, 328 p. (in Russ.).
6. Sidorov A.F., Khayrullina O.B. *Prikladnaya matematika i mekhanika*, 1994, Vol. 58, no. 4, pp. 81–92. (in Russ.).
7. Sidorov A.F. *Doklady Akademii nauk SSSR*, 1990, Vol. 313, no. 2, pp. 283–287. (in Russ.).
8. Krayko A.N. Sfericheski i tsilindricheski simmetrichnoe nestatsionarnoe szhatie ideal'nogo gaza (Spherically and cylindrically symmetric nonstationary compression of an ideal gas). *VII Zababakhinskie nauchnye chteniya* (Proc. VII Zababakhin Scientific Talks Conference), Snezhinsk, 2003. <http://www.vniitf.ru/rig/konfer/7zst/reports/s6/6-1.pdf> (in Russ.).
9. Krayko A.N. *Prikladnaya matematika i mekhanika*, 2007, Vol. 71, no. 5, pp. 744–760. (in Russ.).
10. Kuropatenko V.F. *Modeli mekhaniki sploshnykh sred* [Models of continuum mechanics]. Chelyabinsk: Chelyabinskiy gosudarstvennyy universitet Publ., 2007, 302 p. (in Russ.).
11. Kuropatenko V.F., Shestakovskaya E.S., Yakimova M.N. Dynamic compression of a cold gas sphere. *Doklady Physics*, 2015, Vol. 60, Issue 4, pp. 180–182. DOI: 10.1134/S1028335815040059
12. Kuropatenko V.F., Shestakovskaya E.S. Analytical solution of the problem of a shock wave in the collapsing gas in Lagrangian coordinates. *AIP Conference Proceedings*, 2016, Vol. 1770, Issue 1, p. 030069. DOI:10.1063/1.4964011

Received September 18, 2017

МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ ОПТИЧЕСКИХ СУПЕРОСЦИЛЛЯЦИЙ НА ОСНОВЕ ТРЕХВОЛНОВОЙ ИНТЕРФЕРЕНЦИИ

М.А. Дрязгов, И.В. Свиридова, Д.С. Исаков, Ю.В. Микляев

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: dryazgovm@gmail.com

Оптические суперосцилляции являются одним из способов преодоления дифракционного предела. Явление суперосцилляций известно уже более полувека, но до сих пор существуют весьма ограниченный набор формы получаемых картин распределения света. Использование интерференции пучков Бесселя и Гаусса в настоящий момент является наиболее исследованным теоретически и фактически единственным методом получения оптических суперосцилляций на практике. В данной работе представлен новый метод получения оптических суперосцилляций, основанный на явлении трехволновой интерференции. Исследованы теоретические основы получения оптических суперосцилляций на основе рассмотрения распределения амплитуды поля при интерференции трёх когерентных коллимированных источников. Исследована зависимость контраста оптических суперосцилляций от соотношения амплитуд волн, которая имеет экспоненциальный вид. Также исследована зависимость размера оптических суперосцилляций от их контраста, которая, как оказалось, имеет степенную форму. Выполнено моделирование двумерных интерференционных картин оптических суперосцилляций, создаваемых тремя компланарными волнами. В этом случае оптические суперосцилляции имеют постоянный размер вдоль интерференционных полос. В случае некопланарных волн при движении вдоль интерференционных полос наблюдается периодическое исчезновение и появление оптических суперосцилляций.

Ключевые слова: оптические суперосцилляции; интерференция; субволновые эффекты.

Введение

Современные темпы развития технологий приводят к постоянному уменьшению размеров как используемых инструментов, так и создаваемых изделий. Это требует увеличения разрешающей способности измерительной и контролирующей аппаратуры, что, в свою очередь, ведёт к развитию микроскопии. Однако существование фундаментального ограничения разрешающей способности, так называемого «дифракционного предела» [1], существенно ограничивает эту область исследований.

$$d_{\min} = \frac{\lambda}{2n}, \quad (1)$$

где d_{\min} – минимальный диаметр пятна, в которое можно сфокусировать электромагнитное излучение, λ – длина волны электромагнитного излучения в вакууме, n – показатель преломления среды, в которой распространяется излучение.

Существует множество способов как уменьшить влияние этого ограничения (использование рентгеновских волн [2, 3], иммерсионная микроскопия [4]), так и полностью его избежать (зондовая микроскопия [5–7]). Одним из способов преодоления дифракционного предела в оптике (получения сверхразрешения как в микроскопии, так и в литографии) является использование оптических суперосцилляций.

Суперосцилляции – это локальные участки в распределении интенсивности, которые имеют характерные размеры деталей существенно меньшие половины длины волны. Другими словами,

локально эти осцилляции имеют период меньше периода самых высоких пространственных частот, допустимых диапазоном несущих частот [8, 9].

Первые упоминания о суперосцилляциях в радиоволнах встречаются в 1940-х годах, когда была использована антенна специального вида для фокусировки радиоволн в сколь угодно малую область [10, 11]. Было обнаружено, что лишь малая часть мощности излучения может существовать в виде суперосцилляций, остальная часть приходилась на сильное гало.

В 1952 появилась идея применить подобный интерференционный принцип для получения суперосцилляций в области видимого электромагнитного излучения [12, 13]. И всего несколько лет назад (в 2012 году) оптические суперосцилляции были практически получены с помощью сложения пучков Бесселя и Гаусса [14, 15].

В данной работе предложен другой способ создания оптических суперосцилляций, основанный на интерференции нескольких коллимированных пучков. Проведено теоретическое исследование таких оптических суперосцилляций, получены зависимости их размера и амплитуды от параметров схемы интерференции.

Теоретические основы получения оптических суперосцилляций

Как известно, распределение амплитуды поля при интерференции N когерентных коллимированных источников излучения может быть представлено в виде:

$$A = \sum_{i=1}^N A_i e^{-i\vec{k}_i \vec{r}_i}. \quad (2)$$

Здесь k_i – волновой вектор i -ой волны, $k_i = 2\pi/\lambda$. При $N = 2$ мы получаем синусоидальное распределение интенсивности $I = |A|^2$. Наименьший период этого распределения равен половине длины волны при встречном распространении волн (когда $\vec{k}_1 = -\vec{k}_2$). На рис. 1, *a* показано распределение амплитуды электрического поля волны вдоль оси X и соответствующее распределение интенсивности для случая, когда биссектриса между векторами $\vec{k}_1 = -\vec{k}_2$ параллельна оси Y .

Простейший случай возникновения суперосцилляции наблюдается уже при рассмотрении интерференции трех коллимированных волн. Возьмем три волны с компланарными волновыми векторами, причем волновой вектор третьей волны направлен по биссектрисе угла между первыми двумя волнами. Если волновой вектор 2-ой волны параллелен оси Y , то график распределения амплитуды вдоль оси X будет иметь вид, показанный на рис. 1, *b*. Как видим, по сравнению с рис. 1, *a* график сместился по вертикали на постоянную величину, зависящую от амплитуды этой 3-ей волны. При этом в распределении интенсивности $I(x)$ (рис. 1, *b*) возникают локальные участки, чей размер, то есть расстояние между двумя нулями, меньше, чем $\lambda/2$, а интенсивность существенно ниже, чем у окружающих их пиков. Эти локальные максимумы можно классифицировать как простейший случай суперосцилляций. В связи с этим представляет особый интерес исследование свойств именно этого вида суперосцилляций.

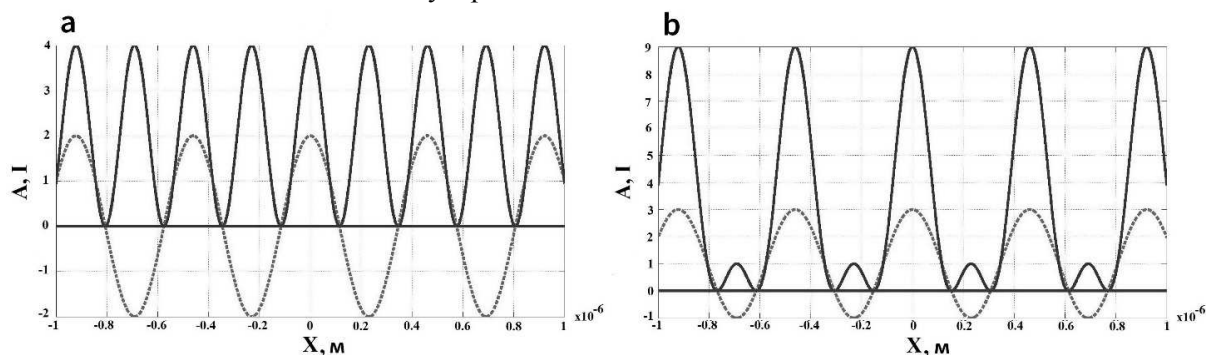


Рис. 1. Распределение амплитуды и интенсивности при интерференции 2-х волн (а) и 3-х компланарных волн (б). Значения амплитуды и интенсивности взяты в условных единицах. Распределение интенсивности выделено толстой линией

Дополнительной особенностью данного вида суперосцилляций является их повторяемость с малым периодом.

Зависимость размера и амплитуды оптических суперосцилляций от амплитуды одной из интерферирующих волн

Интенсивность и размер оптических суперосцилляций зависят от соотношения амплитуд интерферирующих волн. В данной работе мы исследовали изменения этих параметров при варьировании интенсивности волны, распространяющейся между двумя другими волнами, когда амплитуды этих волн равны между собой.

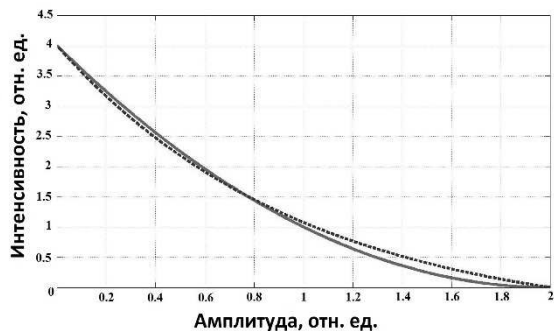


Рис. 2. График зависимости интенсивности оптических суперосцилляций от амплитуды 3-ей волны источника. Сплошная линия соответствует обнаруженной зависимости, пунктирная соответствует аппроксимации вида $C_1e^{-x} + C_2$

На рис. 2 показан график зависимости интенсивности оптических суперосцилляций от амплитуды 3-ей волны. Можно заметить, что зависимость имеет вид $y = C_1e^{-x} + C_2$, где C_1 и C_2 – константы, подобранные так, чтобы концы графиков совпадали. Если рассматривать относительные величины амплитуд, то при $A_3 = 2$ и $A_1 = A_2 = 1$ оптические суперосцилляции пропадают, так как график распределения A поднимается так высоко над осью абсцисс, что уже не пересекает её. При $A_3 = 0$ интенсивность оптических суперосцилляций равна 4, то есть квадрату суммы амплитуд 2-х других волн. Это соответствует тому, что оптические

суперосцилляции превращаются в обычные интерференционные полосы.

На рис. 3 показан график зависимости размера оптических суперосцилляций от их интенсивности. Можно заметить, что зависимость имеет вид $y = C_3\sqrt[3]{x}$. Причём, когда размер суперосцилляций стремится к нулю, их интенсивность также стремится к нулю. Когда их интенсивность равна 4, то есть интенсивности обычных интерференционных полос, размер оптических суперосцилляций равен половине длины волны, то есть оптические суперосцилляции превращаются в обычные интерференционные полосы.

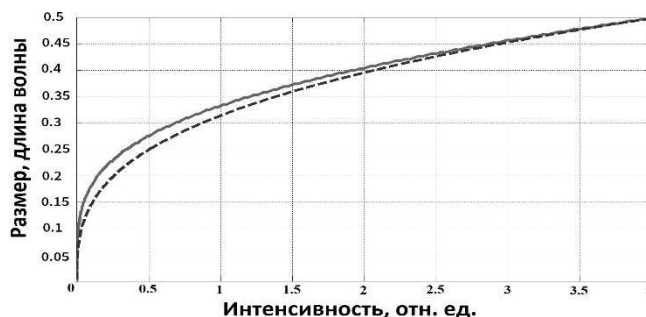


Рис. 3. График зависимости размера оптических суперосцилляций от их интенсивности. Сплошная линия соответствует обнаруженной зависимости, пунктирная соответствует предполагаемой зависимости

Двумерное распределение интенсивности при интерференции трех волн

В ходе реального эксперимента происходит наблюдение не за одномерным срезом, а за двумерной интерференционной картиной. Поэтому для наглядности была смоделирована 2D интерференционная картина от 3-х плоских волн с компланарными волновыми векторами (рис. 4, а). На картине видны обычные светлые интерференционные полосы, а посередине тёмных интерференционных полос наблюдаются тонкие светлые полосы, соответствующие оптическим суперосцилляциям.

Однако, если волновой вектор 3-ей волны сместить из плоскости, образуемой волновыми векторами первых двух волн, интерференционная картина потеряет трансляционную симметрию вдоль оси Y . На рис. 4, б показана интерференционная картина, соответствующая случаю, когда проекция волнового вектора третьей волны на исходную плоскость направлена по биссектрисе между волновыми векторами двух других волн. При движении вдоль оси Y наблюдается появление и последующее исчезновение суперосцилляционных полос (тонкие полосы на фоне темных полос). Такое поведение связано с тем, что при движении вдоль оси Y происходит монотонное изменение сдвига фаз между первыми двумя и третьей волной.

На рис. 5 показано, как смещение волнового вектора 3-ей волны из плоскости волновых векторов двух других волн влияет на изменение получаемой интерференционной картины оптические

ских суперосцилляций. На плоскости XY была выбрана область для моделирования, по OZ откладывалась интенсивность.

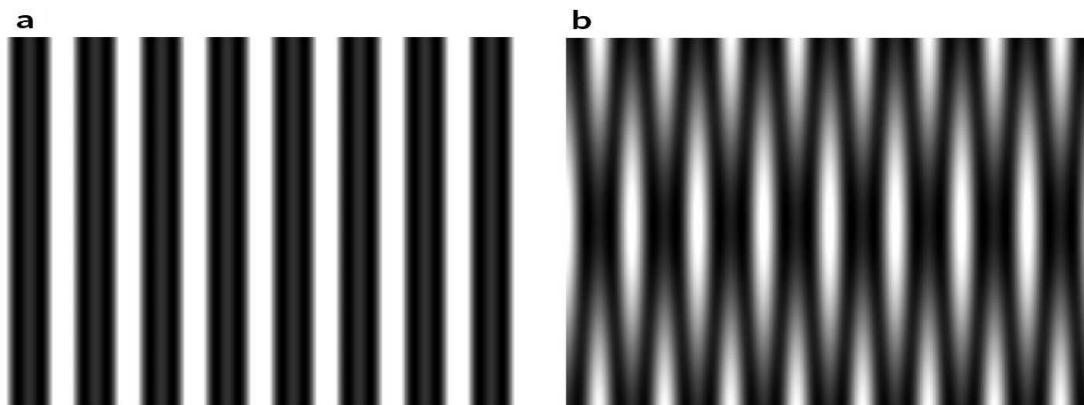


Рис. 4. а) Интерференционная картина от 3-х плоских волн с компланарными волновыми векторами; б) интерференционная картина от 3-х плоских волн в случае, когда волновой вектор третьей волны выходит из плоскости, образуемой волновыми векторами первых двух волн

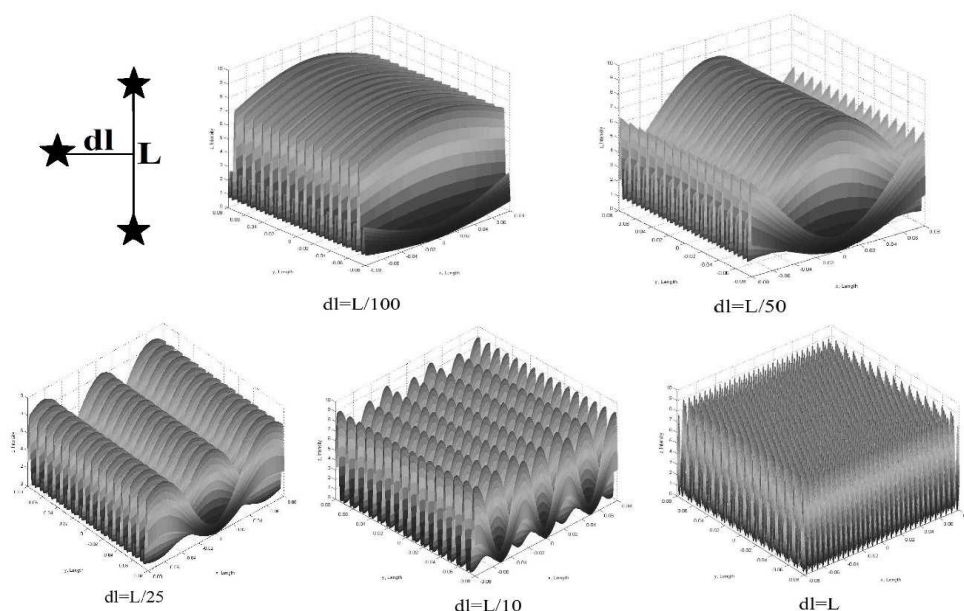


Рис. 5. Зависимость перетекания оптических суперосцилляций в обычные интерференционные полосы от отклонения волнового вектора 3-ей волны от плоскости, образуемой волновыми векторами двух других волн

Как видно из рис. 5, при незначительном отклонении 3-го волнового вектора (отношение проекций $k_{3y}/k_{3x}=1/100$) интерференционная картина слабо изменяется в пространстве. Но при увеличении этого расстояния на исследуемом участке увеличивается количество переходов оптических суперосцилляций в обычные интерференционные полосы. В итоге, все три волны попарно интерферируют между собой и интерференционные картины накладываются друг на друга.

Заключение

Исследован метод получения оптических суперосцилляций, основанный на интерференции от трёх коллимированных волн. Получены следующие результаты:

- 1) зависимость интенсивности оптических суперосцилляций от амплитуды 3-ей волны источника имеет экспоненциальный вид;
- 2) зависимость размера оптических суперосцилляций от их интенсивности имеет вид корневой зависимости.

3) получены распределения интенсивности света, соответствующие интерференции компланарных и некопланарных волн, обеспечивающие возникновение как одномерных, так и двумерных суперосцилляций; обнаружено исчезновение суперосцилляций при удалении от некопланарной ориентации волновых векторов.

Литература

1. Rogers, E.T.F. Optical super-oscillations: sub-wavelength light focusing and super-resolution imaging / E.T.F. Rogers, N.I. Zheludev // *Journal of Optics*. – 2013. – Vol. 15, no. 9. – P. 94008.
2. Phase evolution in single-crystalline LiFePO₄ followed by in situ scanning X-ray microscopy of a micrometre-sized battery / N. Ohmer, B. Fenk, D. Samuelis *et al.* // *Nature Communications*. – 2015. – Vol. 6. – Article no. 6045.
3. Scanning transmission X-ray microscopy studies of chromium hydroxide hollow spheres and nanoparticles formed by gamma-radiation / Z. Wang, L. Alrehaily, J. Joseph *et al.* // *Canadian Journal of Chemistry*. – 2017. – e-First Article: P. 1–5.
4. Brakenhoff, G.J. Confocal scanning light microscopy with high aperture immersion lenses / G.J. Brakenhoff, P. Blom, P. Barends // *Journal of Microscopy*. – 1979. – Vol. 117, Issue 2. – P. 219–232.
5. Miklyayev, Y.V. Optical near-field scanning by microparticles suspended in immersion fluid / Y.V. Miklyayev, S.A. Asselborn, A.M. Gerasimov // *Technical Physics Letters*. – 2014. – Vol. 40, Issue 8. – P. 640–643.
6. Superresolution microscopy in far-field by near-field optical random mapping nanoscopy / Y.V. Miklyayev, S.A. Asselborn, K.A. Zaytsev, M.Y. Darscht // *Applied Physics Letters*. – 2014. – Vol. 105, Issue 11. – P. 113103.
7. Superresolved nanoscopy using Brownian motion of fluorescently labeled gold nanoparticles / T. Ilovitsh, A. Ilovitsh, O. Wagner, Z. Zalevsky // *Applied Optics*. – 2017. – Vol. 56, Issue 5. – P. 1365–1369.
8. Wong, A.M.H. Superoscillations without Sidebands: Power-Efficient Sub-Diffraction Imaging with Propagating Waves / A.M.H. Wong, G.V. Eleftheriades // *Scientific Reports*. – 2015. – Vol. 5. – Article no. 8449.
9. Chojnacki, L. New methods for creating superoscillations / L. Chojnacki, A. Kempf // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. – 2016. – Vol. 49, no. 50. – P. 505203.
10. Bouwkamp, C.J. The problem of optimum antenna current distribution / C.J. Bouwkamp, N.G. de Bruijn // *Philips Research Reports*. – 1945. – Vol. 1. – P. 135–158.
11. Woodward, B.P.M. The theoretical precision with which an arbitrary radiation-pattern may be obtained from a source of finite size, (2) / B.P.M. Woodward, J.D. Lawson // *Journal of the Institution of Electrical Engineers – Part I: General*. – 1948. – Vol. 95, no. 93. – P. 405.
12. Di Francia, G.T. Super-gain antennas and optical resolving power / G.T. Di Francia // *Il Nuovo Cimento*. – 1952. – Vol. 9, Supplement 3. – P. 426–438.
13. Wong, A.M.H. Adaptation of Schelkunoff's superdirective antenna theory for the realization of superoscillatory antenna arrays / A.M.H. Wong, G.V. Eleftheriades // *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*. – 2010. – Vol. 9. – P. 315–318.
14. Experimental generation of arbitrarily shaped diffractionless superoscillatory optical beams / E. Greenfield, R. Schley, I. Hurwitz *et al.* // *Optics Express*. – 2013. – Vol. 21, Issue 11. – pp. 13425–13435.
15. A super-oscillatory lens optical microscope for subwavelength imaging / E.T.F. Rogers, J. Lindberg, T. Roy // *Nature Materials*. – 2012. – Vol. 11, Issue 5. – P. 432–435.

Поступила в редакцию 26 сентября 2017 г.

A NEW METHOD OF OBTAINING OPTICAL SUPER-OSCILLATIONS BASED ON THREEWAVE INTERFERENCE

M.A. Dryazgov, I.V. Sviridova, D.S. Isakov, Yu.V. Miklyaev

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: dryazgovm@gmail.com

Optical super-oscillation is one of the methods to overcome diffraction limit. The phenomenon of super oscillations has been known for more than half a century, but there is still a limited set of shapes of the resulting light distribution patterns. The use of interference of Bessel and Gauss beams is currently the most studied theoretically and in fact the only method of obtaining optical super oscillations in practice. The paper presents a new method of obtaining optical super-oscillations based on three wave interference. We have studied the theoretical basis for obtaining optical super-oscillations considering distribution of the field amplitude in the interference of three coherent collimated sources. The dependence of the contrast of optical super-oscillations on the ratio of wave amplitudes, which has an exponential form, is studied. The correlation of the size of optical super-oscillations depending on the contrast which is proved to be of a power form is analyzed. We have modeled two-dimensional interference patterns of optical super-oscillations obtained by three coplanar waves. In this case optical super oscillations have a constant size along interference fringes. In case of noncoplanar waves when moving along interference fringes periodic extinction and appearance of optical super-oscillations are observed.

Keywords: optical super-oscillations; interference; subwave effects.

References

1. Rogers E.T.F., Zheludev N.I. Optical super-oscillations: sub-wavelength light focusing and super-resolution imaging. *Journal of Optics*, 2013, Vol. 15, no. 9, p. 94008. DOI: 10.1088/2040-8978/15/9/094008
2. Ohmer N., Fenk B., Samuelis D., Chen C.-C., Maier J., Weigand M., Goering E., Schütz G. Phase evolution in single-crystalline LiFePO₄ followed by in situ scanning X-ray microscopy of a micrometre-sized battery. *Nature Communications*, 2015, Vol. 6, Article no. 6045. DOI: 10.1038/ncomms7045
3. Wang Z., Alrehaily L., Joseph J., Wren J.C., Wang J., Sham T.-K. Scanning transmission X-ray microscopy studies of chromium hydroxide hollow spheres and nanoparticles formed by gamma-radiation. *Canadian Journal of Chemistry*, 2017, e-First Article: pp. 1–5. DOI: 10.1139/cjc-2017-0142
4. Brakenhoff G.J., Blom P., Barends P. Confocal scanning light microscopy with high aperture immersion lenses. *Journal of Microscopy*, 1979, Vol. 117, Issue 2, pp. 219–232. DOI: 10.1111/j.1365-2818.1979.tb01178.x
5. Miklyaev Y.V., Asselborn S.A., Gerasimov A.M. Optical near-field scanning by microparticles suspended in immersion fluid. *Technical Physics Letters*, 2014, Vol. 40, Issue 8, pp. 640–643. DOI: 10.1134/S1063785014080100
6. Miklyaev Y.V., Asselborn S.A., Zaytsev K.A., Darscht M.Y. Superresolution microscopy in far-field by near-field optical random mapping nanoscopy. *Applied Physics Letters*, 2014, Vol. 105, Issue 11, p. 113103. DOI: 10.1063/1.4895922
7. Ilovitsh T., Ilovitsh A., Wagner O., Zalevsky Z. Superresolved nanoscopy using Brownian motion of fluorescently labeled gold nanoparticles. *Applied Optics*, 2017, Vol. 56, Issue 5, pp. 1365–1369. DOI: 10.1364/AO.56.001365
8. Wong A.M.H., Eleftheriades G.V. Superoscillations without Sidebands: Power-Efficient Sub-Diffraction Imaging with Propagating Waves. *Scientific Reports*, 2015, Vol. 5, Article no. 8449. DOI: 10.1038/srep08449

9. Chojnacki L., Kempf A. New methods for creating superoscillations. *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*, 2016, Vol. 49, no. 50, p. 505203. DOI: 10.1088/1751-8113/49/50/505203
10. Bouwkamp C.J., Bruijn, de, N.G. The problem of optimum antenna current distribution. *Philips Research Reports*, 1945, Vol. 1, pp. 135–158.
11. Woodward B.P.M., Lawson J.D. The theoretical precision with which an arbitrary radiation-pattern may be obtained from a source of finite size, (2). *Journal of the Institution of Electrical Engineers - Part I: General*, 1948, Vol. 95, no. 93, p. 405. DOI: 10.1049/ji-1.1948.0163
12. Di Francia G.T. Super-gain antennas and optical resolving power. *Il Nuovo Cimento*, 1952, Vol. 9, Supplement 3, pp. 426–438. DOI: 10.1007/BF02903413
13. Wong A.M.H., Eleftheriades G.V. Adaptation of Schelkunoff's superdirective antenna theory for the realization of superoscillatory antenna arrays. *IEEE Antennas and Wireless Propagation Letters*, 2010, Vol. 9, pp. 315–318. DOI: 10.1109/LAWP.2010.2047710
14. Greenfield E., Schley R., Hurwitz I., Nemirovsky J., Makris K.G., Segev M. Experimental generation of arbitrarily shaped diffractionless superoscillatory optical beams. *Optics Express*, 2013, Vol. 21, Issue 11, pp. 13425–13435. DOI: 10.1364/OE.21.013425
15. Rogers E.T.F., Lindberg J., Roy T., Savo S., Chad J.E., Dennis M.R., Zheludev N.I. A superoscillatory lens optical microscope for subwavelength imaging. *Nature Materials*, 2012, Vol. 11, Issue 5, pp. 432–435. DOI: 10.1038/nmat3280

Received September 26, 2017

ХИМИЧЕСКИЕ ПОТЕНЦИАЛЫ ТЕТРАГОНАЛЬНОГО ФЕРРИТА И ЕГО РАВНОВЕСИЕ С γ -ФАЗОЙ В СТАЛЯХ

Д.А. Мирзаев, А.А. Мирзоев, И.В. Булдашев, К.Ю. Окишев

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: mirzoevaa@susu.ru

Для сталей с бескарбидным бейнитом рассмотрено равновесие тетрагональный феррит/аустенит, возникающее при распаде γ -фазы на примере сплавов Fe-C. Химические потенциалы компонентов вычислялись суммированием соответствующих выражений для α -фазы с кубической решеткой и «тетрагональной» добавкой по теории Зинера–Хачатуряна. Условие равенства химических потенциалов компонентов для двух фаз позволило рассчитать граничные концентрации углерода в α' - и γ -фазах. Установлено, что в тетрагональной α' -фазе рассчитанная концентрация углерода в 40–60 раз выше, чем для обычного кубического феррита. Это открывает новые возможности конструирования высокопрочных сталей со структурой бескарбидного бейнита.

Ключевые слова: тетрагональность; бейнитный феррит; химическое равновесие; теория Хачатуряна.

Введение

Распад переохлажденного аустенита дает различные структуры в зависимости от температуры и скорости превращения. Между ступенью ферритно-перлитного и мартенситного превращения аустенита расположена ступень промежуточного или бейнитного превращения [1], которая в последнее время опять привлекла внимание материаловедов благодаря разработке прекрасных сталей с бескарбидным бейнитом [1, 2]. Структура верхнего бейнита состоит из относительно крупных реек или пластин феррита, чередующихся с рейками карбида Fe_3C . На границах реек и пакетов проявляются тонкие прослойки остаточного аустенита. Выделения Fe_3C или ϵ -карбида в нижнем бейните расположены под углами 60° – 70° к оси реек. Вероятно, они возникают после завершения роста пакета. Несомненно, что в условиях непрерывного охлаждения, а тем более в ходе изотермической выдержки, существует период времени, в течение которого аустенит и бейнитный феррит могут обмениваться атомами углерода. При этом аустенит обогащается углеродом, бейнит, напротив, обедняется, а часть углерода выделяется в виде карбида, в большей степени для верхнего, в меньшей – для нижнего бейнита. Однако если сталь содержит легирующие элементы (Si, Al) [1, 2], действие которых проявляется не только в уменьшении коэффициента диффузии углерода, но и в устойчивости карбидов, то в условиях непрерывного охлаждения или изотермической закалки возникает структура бескарбидного бейнита, включающая также остаточный аустенит и мартенсит последующего охлаждения. Изотермически закаленная сталь с бескарбидным бейнитом обладает [2, 3] высоким уровнем конструкционной прочности, тогда как появление частиц карбида приводит к резкому снижению сопротивления удару. Таким образом, в сталях с бескарбидным бейнитом возникает равновесие феррит-аустенит, которое можно изучать при низких температурах.

Бхадешия одним из первых обратил внимание [4–6] на отмеченные свойства кремнистых сталей. Им были разработаны новые высокоуглеродистые Mn-Si-стали, в которых при изотермической закалке возникают тонкие (до 20 нм) пластины или рейки бейнитного феррита и сохраняется остаточный аустенит, который при пластической деформации превращается в мартенсит, что обеспечивает прекрасное сочетание пластичности и прочности.

Удивительным явилось то обстоятельство, что бейнит в этих сталях имеет тетрагональную кристаллическую решетку, что ранее не наблюдалось, вероятно, вследствие выделения карбидов. Факт тетрагональности подтвержден прямыми экспериментами в работах [7, 8]. Бхадешия представил [6] диаграмму равновесия тетрагонального феррита (α') и аустенита (γ) при различных температурах. Оказалось, что равновесная концентрация углерода в феррите увеличилась при этом многократно. Однако проведенный автором расчет изменения энергии растворения углеро-

да при переходе от кубического к тетрагональному ферриту имеет ряд недостатков. В кубическом феррите углерод равномерно распределен между тремя подрешетками октапор (x -, y -, z -типа). Бхадешия, как обычно при первопринципных расчетах, использовал периодические граничные условия [6], а в суперячейку помещал единственный атом углерода. Такие условия «транслируют» данный атом всегда в подрешетку одного вида. Поэтому фактически Бхадешия рассчитал энергию растворения углерода в кубическом феррите с содержанием углерода 1,3 мас. %. В естественных условиях такой кубический феррит не стабилен; подобно мартенситу он должен приобрести тетрагональную решетку, вытянутую вдоль оси z с отношением $c/a = 1,059$. В реальности, чтобы создать такой кубический феррит, необходимо к тетрагональному кристаллу приложить сжимающее вдоль оси z и растягивающие вдоль осей x и y напряжения, которые увеличат полную энергию системы за счет дополнительного вклада упругой энергии. Эта добавочная энергия приводит к увеличению энергии растворения углерода в кубической ферритной фазе и, возможно, к завышенному результату для разности энергий растворения. Второй недостаток подхода состоит в том, что автор не описывает процедуру расчета фазовой диаграммы тетрагональный феррит/аустенит, для которого необходим учет изменения энтропии углерода при переходе от неупорядоченного распределения к упорядоченному в z -подрешетке для тетрагонального феррита. Поскольку этот очень важный факт не отмечен, то, скорее всего, автор принимал энтропию в обоих состояниях одинаковой. Полученная Бхадешия фазовая диаграмма чрезвычайно важна для понимания направлений развития данного класса сталей. Однако точный расчет такой диаграммы возможен только при знании химических потенциалов углерода и железа применительно хотя бы к углеродистым сталям. В связи с этим данная статья посвящена анализу химических потенциалов тетрагонального феррита и строгому расчету диаграммы равновесия $\gamma \leftrightarrow \alpha'$.

Химические потенциалы компонентов кубического феррита

Теория идеальных растворов внедрения, в том числе углерода в железе, была разработана в работах [9–10]. На ее основе получено выражение для термодинамической вероятности W и энтропии S распределения n атомов углерода по βN октаэдрическим порам решетки железа

$$S = k_B \ln W = -k_B \left(n_C \ln \frac{n_C}{\beta N - n_C} + \beta N \ln \frac{\beta N - n_C}{\beta N} \right), \quad (1)$$

где n_C и N – количество растворенных атомов углерода и атомов растворителя, а β – число октаэдрических пор, приходящихся на атом железа ($\beta = 1$ для ГЦК и $\beta = 3$ для ОЦК решетки железа). Энтропийные вклады в молярные химические потенциалы компонентов составят:

$$\mu_{C(S)}^\alpha = RT \ln \frac{x_C^\alpha}{3 - 4x_C^\alpha}; \mu_{C(S)}^\gamma = RT \ln \frac{x_C^\gamma}{1 - 2x_C^\gamma}; \mu_{Fe(S)}^\alpha = RT \ln \frac{3 - 4x_C^\alpha}{3(1 - x_C^\alpha)}; \mu_{Fe(S)}^\gamma = RT \ln \frac{1 - 2x_C^\gamma}{1 - x_C^\gamma}, \quad (2)$$

где x_C и x_{Fe} – атомные доли углерода и железа в α - или γ -растворах.

Если за стандартное состояние углерода в растворе принять графит, то растворение графита в железе формально можно разделить на ряд этапов: 1) диссоциация графита на отдельные атомы С; 2) помещение атомов С в октаэдрические поры железа, при котором возникает потенциальная энергия E связи С-Fe, кинетическая энергия и энтропия колебаний атомов углерода; 3) включение взаимодействия ΔU атомов углерода друг с другом в объеме, содержащем N атомов железа, которое изменит и вибрационную энтропию ΔS^* . Поскольку два первых вклада пропорциональ-

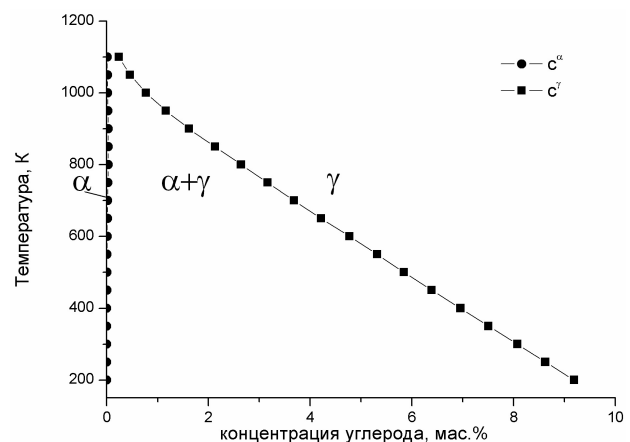


Рис. 1. Результаты расчёта диаграммы фазового равновесия кубический феррит/аустенит. Содержание углерода пересчитано от атомных долей в мас.%

ны числу атомов С, то они войдут в химический потенциал атомов углерода. Обозначим их сум-
му как φ_C^0 . Третье слагаемое при точном расчете имеет вид $\beta \left(\frac{x_C}{\beta(1-x_C)} \right)^2 (\Delta U - T\Delta S^*)$, поэтому
после дифференцирования оно войдет в выражения для химических потенциалов обоих компо-
нентов:

$$\mu_{Fe} = {}^0G_{Fe} + \beta \left(\frac{x_C}{\beta(1-x_C)} \right)^2 (\Delta U - T\Delta S^*) + \beta \cdot RT \ln \frac{\beta(1-x_C) - x_C}{\beta(1-x_C)}; \quad (3a)$$

$$\mu_C = {}^0G_C^{zp} + \varphi_C^0 - 2 \frac{x_C}{(1-x_C)} (\Delta U - T\Delta S^*) + RT \ln \frac{x_C}{\beta(1-x_C) - x_C}, \quad (3б)$$

где ${}^0G_{Fe}$ – свободная энергия чистого α - или γ - железа, а ${}^0G_C^{zp}$ – свободная энергия графита.

Конкретно в данном исследовании были использованы термодинамические функции альфа-
и гамма-растворов (Дж/моль), взятые из работ Агрена [11], который опирался на исследование
Харвига [12]:

$$\mu_C^\gamma = {}^0G_C^{zp} + 46115 - 19,178 \cdot T + RT \cdot \ln \frac{x_C^\gamma}{1-2x_C^\gamma} + 2 \frac{x_C^\gamma}{1-x_C^\gamma} (21079 + 11,555 \cdot T); \quad (4a)$$

$$\mu_{Fe}^\gamma = {}^0G_{Fe}^\gamma + RT \ln \frac{1-2x_C^\gamma}{1-x_C^\gamma} - \left(\frac{x_C^\gamma}{1-x_C^\gamma} \right)^2 (21079 + 11,555 \cdot T); \quad (4б)$$

$$\mu_C^\alpha = {}^0G_C^\alpha + 108299 - 39,603 \cdot T + RT \cdot \ln \frac{x_C^\alpha}{3-4x_C^\alpha}; \quad (4в)$$

$$\mu_{Fe}^\alpha = {}^0G_{Fe}^\alpha + 3RT \ln \frac{3-4x_C^\alpha}{3(1-x_C^\alpha)}. \quad (4г)$$

Сравнивая эти выражения с общими формулами (3) для регулярных растворов внедрения,
можно заключить, что по Агрону энергия взаимодействия атомов углерода в ОЦК (α -
неупорядоченном растворе близка к нулю. В то же время в гамма-фазе между ними наблюдается
отталкивание. Приравняв химические потенциалы углерода и железа для феррита и аустенита, а
именно $\mu_C^\gamma = \mu_C^\alpha$ и $\mu_{Fe}^\gamma = \mu_{Fe}^\alpha$, получим уравнения равновесия альфа- и гамма-растворов:

$$({}^0G_{Fe}^\gamma - {}^0G_{Fe}^\alpha) + RT \ln \frac{1-2x_C^\gamma}{1-x_C^\gamma} - \left(\frac{x_C^\gamma}{1-x_C^\gamma} \right)^2 (21079 + 11,555 \cdot T) - 3RT \ln \frac{3-4x_C^\alpha}{3(1-x_C^\alpha)} = 0; \quad (5a)$$

$$62184 - 20,425 \cdot T + RT \cdot \left(\ln \frac{x_C^\alpha}{3-4x_C^\alpha} - \frac{1-2x_C^\gamma}{x_C^\gamma} \right) - 2 \frac{x_C^\gamma}{1-x_C^\gamma} (21079 + 11,555 \cdot T) = 0. \quad (5б)$$

Численные значения разности свободных энергий γ - и α -фаз были рассчитаны с помощью
метода, развитого Агреном [11]. Вычисление корней системы уравнений (5a) и (5б) для различ-
ных значений температуры было выполнено численно в программном пакете *Mathcad*. Результа-
ты расчетов представлены на рис. 1 в виде диаграммы α - γ равновесия. Полученные данные хо-
рошо согласуются с реально существующим участком α - γ равновесия диаграммы железо-графит
[10].

Химические потенциалы компонентов тетрагонального α' -феррита

За основу построения химических потенциалов была принята теория упорядочения атомов
углерода в z -подрешетке внедрения мартенсита сплавов Fe-C [13]. Оно обусловлено деформаци-
онным взаимодействием атомов углерода, расположенных в октаэдрических порах с короткой
диагональю октаэдра, ориентированной вдоль оси z . При этом каждый внедренный атом углеро-
да создает поле растяжений, ориентированное вдоль этой оси. Их сумма порождает эффективное

напряжение, устанавливающее, подобно эффективному полю в теории магнетизма [14], упругие диполи преимущественно вдоль z . Это приводит к преимущественному заполнению атомами углерода одной (z) из трех подрешеток внедрения. Для изменения свободной энергии сплава в ходе подобного упорядочения К. Зинер [13], а затем А. Хачатурян [15] получили выражение

$$G(c, T, \eta) = G(c, T, 0) - \frac{1}{3} N c^2 \lambda_0 \eta^2 + \frac{k_B T n_C}{3} [2(1-\eta) \ln(1-\eta) + (1+2\eta) \ln(1+2\eta)], \quad (6)$$

где

$$\eta = \frac{n_C^z - \frac{1}{3} n_C}{\frac{2}{3} n_C} \quad (7)$$

есть параметр порядка, отражающий избыток атомов углерода в z -октаэдрических порах по сравнению с тем количеством, которое должно быть при равномерном заполнении атомами углерода пор типа z , x и y ($n_C^x = n_C^y = n_C^z = \frac{n_C}{3}$). Здесь N и n_C – количество атомов железа и углерода со-

ответственно; λ_0 – параметр деформационного взаимодействия, $c = \frac{n_C}{N} = \frac{x_C}{1-x_C}$, где x_C – доля

атомов углерода в растворе, T – абсолютная температура, k_B – постоянная Больцмана; $G(c, T, 0)$ – свободная энергия раствора при $\eta = 0$, т. е. в неупорядоченном состоянии. Отметим, что энергия деформационного взаимодействия отрицательна, поэтому мы примем, что λ_0 – положительная величина, но вынесем знак минус перед вторым слагаемым в (6). В равновесном состоянии $\frac{\partial G(c, T, \eta)}{\partial \eta} = 0$. В результате решения получаем

$$\frac{k_B T (1-x_C)}{\lambda_0 x_C} = \frac{\eta}{\ln\left(\frac{1+2\eta}{1-\eta}\right)}. \quad (8)$$

Детальный анализ устойчивости процесса упорядочения [16] показал, что указанная зависимость действительна на интервале $0,5 < \eta \leq 1$. Значение $\eta = 0,5$ является критическим. При соответствующей этому значению температуре T_C :

$$T_C = 0,361 \frac{\lambda_0}{k_B} \frac{x_C}{(1-x_C)} \quad (9)$$

должен проявиться переход типа порядок–беспорядок. Прохождение через эту температуру в условиях нагрева будет сопровождаться скачкообразным снижением степени порядка от 0,5 до нуля. В случае охлаждения порядок возникает также скачком.

Для упорядоченного по z состояния, предполагая что $n_C^x = n_C^y$, найдем с учетом (7):

$$n_C^z = \frac{n_C}{3} (1+2\eta); \quad n_C^x = n_C^y = \frac{n_C}{3} (1-\eta). \quad (10)$$

Энтропия разбиения системы из n_C атомов углерода на три группы по n_C^x, n_C^y, n_C^z атомов определяется термодинамической вероятностью W :

$$S = k_B \ln W = k_B \ln \left(\frac{n_C!}{n_C^z! n_C^y! n_C^x!} \right). \quad (11)$$

Используя далее формулу Стирлинга $\ln N! \approx N \ln N - N$, получим выражение для энтропийного множителя в (6).

Перераспределение углерода, по-видимому, происходит на межфазной γ/α -границе в ходе мартенситного превращения, поскольку атом углерода в октапоре аустенита окружен симметрично тремя x -, y - и z -октапорами тетрагональной решетки. Вектор перемещения атома углерода мал во всех случаях, поэтому перераспределение атомов углерода вполне возможно даже при очень высокой, почти звуковой скорости роста. Другая ситуация складывается в случае образо-

вания бейнитного феррита, когда скорость роста мала, и атомы углерода успевают перемещаться на значительные расстояния. Поэтому, если первое слагаемое в (6), связанное с коллективным деформационным взаимодействием, на наш взгляд, остается справедливым и для бейнитного феррита, то энтропийный вклад должен быть изменен. Действительно, необходимо учесть, что произвольный атом углерода в каждой подрешетке может теперь занимать любую из N октапоров. Тогда

$$S = k \ln W = \frac{N!}{(N - n_C^z)! n_C^z!} \cdot \frac{N!}{(N - n_C^y)! n_C^y!} \cdot \frac{N!}{(N - n_C^x)! n_C^x!}. \quad (12)$$

Вновь используя формулу Стирлинга, найдем

$$S = k \ln W = k \left[-(N - n_C^z) \ln \left[\frac{(N - n_C^z)}{N} \right] - (N - n_C^y) \ln \left[\frac{(N - n_C^y)}{N} \right] - \right. \\ \left. - (N - n_C^x) \ln \left[\frac{(N - n_C^x)}{N} \right] - n_C^z \ln \left(\frac{n_C^z}{N} \right) - n_C^y \ln \left(\frac{n_C^y}{N} \right) - n_C^x \ln \left(\frac{n_C^x}{N} \right) \right]. \quad (13)$$

Учтем далее, что в силу равенств (10)

$$\ln \left(\frac{n_C^x}{N} \right) = \ln \frac{n_C}{3N} + \ln(1 - \eta); \quad \ln \left(\frac{n_C^z}{N} \right) = \ln \frac{n_C}{3N} + \ln(1 + 2\eta).$$

Тогда выражение (13) удается привести к виду:

$$S = k \left(n_C - \frac{(n_C)^2}{6N} (1 + 2\eta^2) - n_C \ln \frac{n_C}{N} - \frac{n_C}{3} [(1 + 2\eta) \ln(1 + 2\eta) - 2(1 - \eta) \ln(1 - \eta)] - 3 \ln 3 \right). \quad (14)$$

Величина в (14), заключенная в квадратные скобки, представляет собой энтропию z-упорядочения атомов углерода, которая фигурирует в теории Зинера. Однако полная энтропия углеродной подсистемы существенно больше этого значения благодаря многократному увеличению числа позиций, доступных для размещения атомов внедрения. Что же касается энергии деформационного взаимодействия, то она должна иметь такой же вид и величину, как в теории Зинера-Хачатуряна. Заменяя в (6) выражение для энтропии на (14), получим формулу для изменения свободной энергии $\Delta G_{T,\phi}$ углеродной подсистемы феррита при z-упорядочении. Молярную свободную энергию тетрагонального феррита запишем в виде $G_m^{\alpha'} = \Delta G_{T,\phi} + G_1(x_C^{\alpha'}, T)$, где функция G_1 включает неучтенные слагаемые, необходимые, чтобы в качестве стандартных состояний выступали чистое α -железо, а для углерода – графит:

$$G_1(x_C^{\alpha'}, T) = (1 - x_C^{\alpha'}) \circ G_{Fe}^{\alpha} + x_C^{\alpha'} (\circ G_C^{2p} + \circ \phi_C^{\alpha}). \quad (15)$$

Величина $\circ \phi$ представляет изменение свободной энергии при переходе от стандартного состояния бесконечно разбавленного раствора углерода в α -железе к состоянию графита. Численное значение $\circ \phi_C^{\alpha} = 95\,818 - 41,92 \cdot T$ Дж/моль взято из работы Агрена [11]. Для молярной свободной энергии тетрагонального феррита окончательно получаем:

$$G_m^{\alpha'}(x_C^{\alpha'}, T, \eta) = (1 - x_C^{\alpha'}) \circ G_{Fe}^{\alpha} + x_C^{\alpha'} (\circ G_C^{2p} + \circ \phi_C^{\alpha}) - \frac{1}{3} N_0 \lambda_0 \frac{(x_C^{\alpha'})^2}{1 - x_C^{\alpha'}} \eta^2 + RT x_C^{\alpha'} \ln \left(\frac{x_C^{\alpha'}}{1 - x_C^{\alpha'}} - 1 \right) + \\ + \frac{RT}{6} \frac{(x_C^{\alpha'})^2}{1 - x_C^{\alpha'}} (1 + 2\eta^2) + \frac{1}{3} RT x_C^{\alpha'} [2(1 - \eta) \ln(1 - \eta) + (1 + 2\eta) \ln(1 + 2\eta) - 3 \ln 3]. \quad (16)$$

Используем известные термодинамические формулы [10] для расчета химических потенциалов компонентов сплава

$$\mu_C^{\alpha'} = G_m^{\alpha'} + (1 - x_C^{\alpha'}) \frac{\partial G_m^{\alpha'}}{\partial x_C^{\alpha'}}; \quad \mu_{Fe}^{\alpha'} = G_m^{\alpha'} - x_C^{\alpha'} \frac{\partial G_m^{\alpha'}}{\partial x_C^{\alpha'}}$$

и найдем последние:

$$\mu_C^{\alpha'} = {}^\circ G_C^{2p} + {}^\circ \varphi_C^\alpha + RT \left[\ln \left(\frac{x_C^{\alpha'}}{1-x_C^{\alpha'}} \right) + \frac{1}{3} \frac{x_C^{\alpha'}}{1-x_C^{\alpha'}} \right] - \frac{2}{3} (N_0 \lambda_0 - RT) \frac{x_C^{\alpha'}}{1-x_C^{\alpha'}} \eta^2 +$$

$$+ \frac{1}{3} RT [2(1-\eta) \ln(1-\eta) + (1+2\eta) \ln(1+2\eta) - 3 \ln 3];$$

$$\mu_{Fe}^{\alpha'} = {}^0 G_{Fe}^{\alpha'} - RT \frac{x_C^{\alpha'}}{1-x_C^{\alpha'}} + \frac{1}{3} (N_0 \lambda_0 - RT) \left(\frac{x_C^{\alpha'}}{1-x_C^{\alpha'}} \right)^2 \eta^2. \quad (17б)$$

Далее необходимо выяснить, в какой мере при $\eta = 0$ выражения (17а, б) для химических потенциалов должны перейти в формулы (4в, г) для кубического феррита. Но небольшое отклонение здесь допустимо, поскольку при выводе первых использовано приближенное выражение

Стирлинга. Например, сумма $RT \left[\ln \left(\frac{x_C^\alpha}{1-x_C^\alpha} \right) + \frac{1}{3} \frac{x_C^\alpha}{1-x_C^\alpha} \right]$ представляет собой 2 члена разложения

функции $RT \ln \left(\frac{x_C^\alpha}{1-\frac{4}{3}x_C^\alpha} \right)$ в ряд по малому параметру $\frac{1}{3} \frac{x_C^\alpha}{1-x_C^\alpha}$. Точно также $RT \frac{x_C^\alpha}{1-x_C^\alpha}$ представ-

ляет первый член разложения функции $3RT \ln \left(\frac{3-4x_C^\alpha}{3(1-x_C^\alpha)} \right)$ (см. (4 г)) в ряд по малому параметру

$\frac{x_C^\alpha}{1-x_C^\alpha}$. Энтропийное слагаемое $RT \ln 3$ возникает и для тетрагонального, и для кубического рас-

творя. В выражении (4г) оно входит в слагаемое $3RT \ln \left(\frac{x_C^\alpha}{3-4x_C^\alpha} \right)$. Поскольку $RT \ll N_0 \lambda_0$, то в

формулах (17а, б) мы пренебрегаем величиной RT . С учетом этих поправок формулы для химических потенциалов компонентов принимают вид:

$$\mu_C^{\alpha'} = {}^\circ G_C^{2p} + {}^\circ \varphi_C^\alpha + RT \ln \left(\frac{x_C^{\alpha'}}{3-4x_C^{\alpha'}} \right) - \frac{2}{3} N_0 \lambda_0 \frac{x_C^{\alpha'}}{1-x_C^{\alpha'}} \eta^2 +$$

$$+ \frac{1}{3} RT [2(1-\eta) \ln(1-\eta) + (1+2\eta) \ln(1+2\eta) - 3 \ln 3];$$

$$\mu_{Fe}^{\alpha'} = {}^0 G_{Fe}^{\alpha'} + 3RT \ln \left(\frac{3-4x_C^{\alpha'}}{3(1-x_C^{\alpha'})} \right) + \frac{1}{3} N_0 \lambda_0 \left(\frac{x_C^{\alpha'}}{1-x_C^{\alpha'}} \right)^2 \eta^2. \quad (18б)$$

Приравнивая химические потенциалы

$$\mu_C^{\alpha'} = \mu_C^\gamma; \mu_{Fe}^{\alpha'} = \mu_{Fe}^\gamma,$$

получаем уравнения равновесия тетрагонального феррита и аустенита:

$$62184 - 20,425T + RT \left[\ln \left(\frac{x_C^{\alpha'}}{3-4x_C^{\alpha'}} \right) - \ln \left(\frac{x_C^\gamma}{1-2x_C^\gamma} \right) \right] - \frac{2}{3} N_0 \lambda_0 \left(\frac{x_C^{\alpha'}}{1-x_C^{\alpha'}} \right) \eta^2 +$$

$$+ \frac{1}{3} RT [2(1-\eta) \ln(1-\eta) + (1+2\eta) \ln(1+2\eta)] - 2 \frac{x_C^\gamma}{1-x_C^\gamma} (21079 + 11,555T) = 0; \quad (19а)$$

$$\begin{aligned} & \left({}^0G_{\text{Fe}}^\gamma - {}^0G_{\text{Fe}}^\alpha \right) + RT \left[-3 \ln \left(\frac{3 - 4x_{\text{C}}^\alpha}{3(1 - x_{\text{C}}^\alpha)} \right) + \ln \left(\frac{1 - 2x_{\text{C}}^\gamma}{1 - x_{\text{C}}^\gamma} \right) \right] - \\ & - \frac{1}{3} N_0 \lambda_0 \left(\frac{x_{\text{C}}^\alpha}{1 - x_{\text{C}}^\alpha} \right)^2 \eta^2 - \left(\frac{x_{\text{C}}^\gamma}{1 - x_{\text{C}}^\gamma} \right)^2 (21079 + 11,555T) = 0. \end{aligned} \quad (196)$$

Третьим уравнением нашей системы выступает соотношение (8), в котором x_{C} следует заменить на x_{C}^α . Оно отражает связь параметра порядка с концентрацией углерода в тетрагональном феррите. При этом требование устойчивости процесса упорядочения [16] приводит к условию $0,5 \leq \eta \leq 1$. Решение системы уравнений (19а) и (19б) для различных значений температуры было выполнено численно в программном пакете *Mathcad*. Формально уравнения (19а, б) при фиксированной температуре можно рассматривать как задание пары функций $x_{\text{C}}^\gamma = f_1(x_{\text{C}}^\alpha)$ и $x_{\text{C}}^\gamma = f_2(x_{\text{C}}^\alpha)$. Пример графиков подобных функции дан на рис. 2 для $T = 700$ К и $\lambda_0 = 10,5$ эВ. Однако для физически реального корня $x_{\text{C}}^\gamma > x_{\text{C}}^\alpha$, как это и наблюдается в действительности для сплавов железо–углерод. Для второго корня, наоборот, $x_{\text{C}}^\gamma \ll x_{\text{C}}^\alpha$, что физически нереально, поэтому второй корень системы уравнений мы отбрасывали. Результаты расчета равновесных концентраций углерода в тетрагональном феррите и аустените показаны на рис. 3 для различных температур и значений константы деформационного взаимодействия λ_0 . По отношению к кубическому содержание углерода в тетрагональном феррите многократно увеличилось. Например, при 600 К содержание углерода в кубическом феррите составляет 0,011 мас. %, тогда как в тетрагональном – 0,92 мас. % (для $\lambda_0 = 10,5$ эВ).

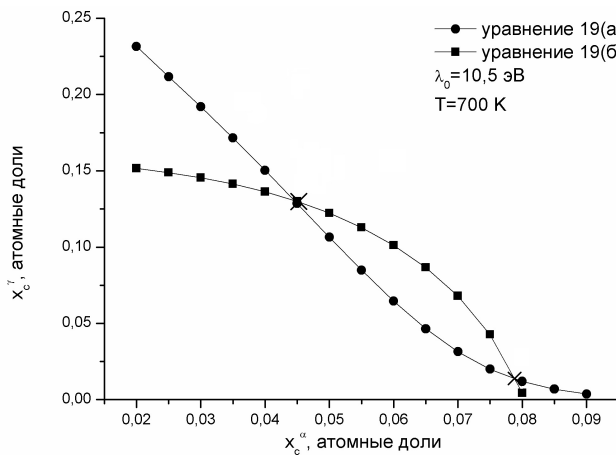


Рис. 2. Пересечение кривых зависимостей согласно уравнениям (19а) и (19б), показывающие существование двух корней (х) для этой системы

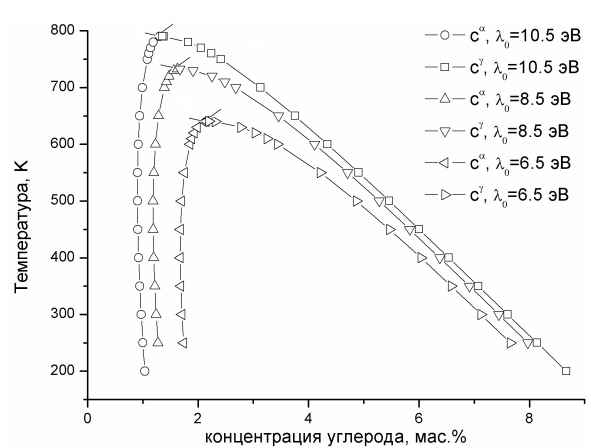


Рис. 3. Пограничные концентрации углерода в мас. % для тетрагонального феррита и аустенита, полученные решением уравнений (19а) и (19б), для условий, когда выделение Fe_3C подавлено

Данные рис. 3 отчетливо показывают, что с уменьшением величины λ_0 пограничная концентрация x_{C}^α возрастает. При повышении температуры эта концентрация сначала слегка уменьшается, но в области высоких температур начинает возрастать. В то же время пограничная концентрация углерода в аустените монотонно снижается при возрастании температуры, так что эти две кривые смыкаются, как бы создавая купол. Для температур выше купола корней тетрагонального решения уже нет. При этом параметр порядка $\eta = 0$, т. е. могут существовать только кубические решения, и, соответственно, граничная концентрация углерода должна резко уменьшиться. В приведенном выше примере – в 90 раз. Но следует помнить, что в нашем рассмотрении на выделение карбидов был наложен запрет.

Основной итог полученных результатов состоит в том, что пограничная концентрация углерода в тетрагональном бейните оказывается очень высокой по сравнению с равновесием кубический феррит/аустенит. В области высоких температур в реальности выделение карбидов Fe_3C подавить невозможно, но в области 500–600 К, где бескарбидный бейнит может образовываться, следует ожидать сильнейшего возрастания углерода в нем до 1–1,2 мас. %.

Итоги работы

1. На основе физической термодинамики сталей и теории Зинера–Хачатуряна для деформационного взаимодействия атомов углерода в мартенсите построены химические потенциалы углерода и железа для тетрагонального феррита в бейните

2. Отличие представленной теории от теории Бхадешия состоит в том, что в ней более точно учтено как изменение энергии при z -упорядочении атомов углерода, так и энтропии, связанной с этим процессом.

3. Используя условие равенства химических потенциалов, записаны уравнения равновесия компонентов и найдены решения полученной системы для различных температур и значений параметра деформационного взаимодействия λ_0 . Построены диаграммы фазового равновесия $\alpha_{tet} \rightleftharpoons \gamma$.

4. Проведенный расчет поддерживает идею Бхадешия о том, что подавление карбидообразования при формировании бейнита приводит к резкому росту растворимости углерода в нем до 1,2 мас. %, что открывает новые возможности конструирования сталей на основе бескарбидного бейнита. Показано, что этот эффект связан с возникновением тетрагональности в бейните, аналогично мартенситу.

5. Величина растворимости углерода в тетрагональном бейните зависит от температуры и параметра λ_0 , на которую, вероятно, можно воздействовать целенаправленным легированием.

Настоящая работа поддержана грантом РНФ (16-19-10252).

Литература

1. Счастливцев, В.М. Структура термически обработанной стали / В.М. Счастливцев, Д.А. Мирзаев, И.Л. Яковлева. – М.: Металлургия, 1994. – 228 с.

2. Влияние скорости охлаждения на количество остаточного аустенита при бейнитном превращении / В.М. Счастливцев, Ю.В. Калетина, Е.А. Фокина, А.Ю. Калетин // ФММ. – 2014. – Т. 115, № 10. – С. 1052–1063.

3. Atomic scale observations of bainite transformation in a high carbon high silicon steel / F. Caballero, M. Miller, S. Babu *et al.* // Acta Materialia. – 2007. – Vol. 55. № 1. – P. 381–390.

4. Bhadeshia, H.K.D.H. Carbon in cubic and tetragonal ferrite / H.K.D.H. Bhadeshia // Philosophical Magazine. – 2013. – Vol. 93, Issue 28-30. – P. 3714–3725.

5. Bhadeshia, H.K.D.H. Bainite in steels: theory and practice / H.K.D.H. Bhadeshia – Maney Publishing, Leeds, U.K., 2015. – 616 p.

6. Jang, J.H. Solubility of carbon in tetragonal ferrite in equilibrium with austenite / J.H. Jang, H.K.D.H. Bhadeshia, D.W. Suh // Scripta Materialia. – 2013. – Vol. 68, № 3-4. – P. 195–198.

7. Caballero F.G. Carbon supersaturation of ferrite in a nanocrystalline bainitic steel / F.G. Caballero, M.K. Miller, C. Garcia-Mateo // Acta Materialia. – 2010. – Vol. 58, Issue 7. – P. 2338–2343.

8. Low temperature bainitic ferrite: Evidence of carbon super-saturation and tetragonality / C. Garcia-Mateo, J.A. Jimenez, H.-W. Yen *et al.* // Acta Materialia. – 2015. – Vol. 91. – P. 162–173.

9. Kaufman, L. Thermodynamics of the Bainite Reaction / L. Kaufman, S.V. Radcliffe, M. Cohen // Trans TMS-AIME. – 1967. – Vol. 239. – P. 313–352.

10. Могутнов, Б.М. Термодинамика железо-углеродистых сплавов / Б.М. Могутнов, И.А. Томилини, Л.А. Шварцман. – М.: Металлургия, 1972. – 328 с.

11. Agren, J.A. Thermodynamic Analysis of the Fe–C and Fe–N Phase Diagrams / J.A. Agren // Metal. Trans. – 1979. – Vol. 10, Issue 12. – P. 1847–1852.

12. Harvig, H. An Extended Version of the Regular Solution Model for Stoichiometric Phases and Ionic Melts / H. Harvig // Acta Chemica Scandinavica. – 1971. – Vol. 25. – P. 3199–3204.

13. Zener, C. Kinetics of the decomposition of austenite / C. Zener // Trans. AIME. – 1946. – Vol. 167. – P. 550–595.

14. Вонсовский, С.В. Ферромагнетизм. / С.В. Вонсовский. – М.: Наука, 1971. – 1032 с.
15. Khachaturyan, A.G. Theory of structural phase transformations in solids / A.G. Khachaturyan. – John Willey, New York, NY. – 1983. – Vol. 17. – P. 1733–1743.
16. Mirzayev, D.A. Ordering of Carbon Atoms in Free Martensite Crystals and When Enclosed in Elastic Matrix. / D.A. Mirzayev, A.A. Mirzoev, P.V. Chirkov // Metallurgical and Materials Transactions A. – 2016. – Vol. 47, № 2. – P. 637–640.

Поступила в редакцию 21 сентября 2017 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2017, vol. 9, no. 4, pp. 66–75*

DOI: 10.14529/mmph170409

CHEMICAL POTENTIALS OF TETRAGONAL FERRITE AND ITS EQUILIBRIUM WITH γ -PHASE IN STEELS

D.A. Mirzayev, A.A. Mirzoev, I.V. Buldashev, K.Yu. Okishev
South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E-mail: mirzoevaa@susu.ru

For steels with non-carbide bainite equilibrium of tetragonal ferrite/austenite occurring in the decay of γ -phase on the basis of Fe–C alloys is considered. Chemical potentials of the components are calculated by summing the corresponding expressions for α -phase with the cubic lattice and tetragonal additive according to Zener–Khachaturyan theory. The condition of equality of chemical potentials of the components for two phases makes it possible to calculate the boundary concentrations of carbon in α - and γ -phases. It is determined that in a tetragonal α -phase the calculated carbon concentration is 40–60 times higher than for conventional cubic ferrite. This opens up new possibilities for the construction of high-strength steel with non-carbide bainite structure.

Keywords: tetragonality; bainite ferrite; chemical equilibrium; Khachaturyan theory.

References

1. Schastlivtsev V.M., Mirzaev D.A., Yakovleva I.L. *Struktura termicheski obrabotannoy stali* (The structure of the thermally treated steel). Moscow, Metallurgiya Publ., 1994, 228 p. (in Russ.).
2. Schastlivtsev V.M., Kaletina Y.V., Fokina E.A., Kaletin A.Y. Effect of cooling rate on the amount of retained austenite upon bainitic transformations. *The Physics of Metals and Metallography*, 2014, Vol. 115, no. 10, pp. 990–1000.
3. Caballero F., Miller M., Babu S., Garcia-Mateo C. Atomic scale observations of bainite transformation in a high carbon high silicon steel. *Acta Materialia*, 2007, Vol. 55, no. 1, pp. 381–390. DOI: 10.1016/j.actamat.2006.08.033
4. Bhadeshia H.K.D.H. Carbon in cubic and tetragonal ferrite. *Philosophical Magazine*, 2013, Vol. 93, Issue 28–30, pp. 3714–3725. DOI: 10.1080/14786435.2013.775518
5. Bhadeshia H.K.D.H. *Bainite in steels: theory and practice*. Maney Publishing, Leeds, U.K., 2015, 616 p.
6. Jang J.H., Bhadeshia H.K.D.H., Suh D.W. Solubility of carbon in tetragonal ferrite in equilibrium with austenite. *Scripta Materialia*, 2013, Vol. 68, no. 3–4, pp. 195–198. DOI: 10.1016/j.scriptamat.2012.10.017
7. Caballero F.G., Miller M.K., Garcia-Mateo C. Carbon supersaturation of ferrite in a nanocrystalline bainitic steel. *Acta Materialia*, 2010, Vol. 58, Issue 7, pp. 2338–2343. DOI: 10.1016/j.actamat.2009.12.020
8. Garcia-Mateo C., Jimenez J.A., Yen H.-W., Miller M.K., Morales-Rivas L., Kuntz M., Ringer S.P., Yang J.-R., Caballero F.G. Low temperature bainitic ferrite: Evidence of carbon super-saturation and tetragonality. *Acta Materialia*, 2015, Vol. 91, pp. 162–173. DOI: 10.1016/j.actamat.2015.03.018

9. Kaufman L., Radcliffe S.V., Cohen M. Thermodynamics of the Bainite Reaction. *Trans TMS-AIME*, 1967, Vol. 239, pp. 313–352.
10. Mogutnov B.M., Tomilin I.A., Shvartsman L.A. *Termodinamika zhelezo-uglerodistykh splavov* (Thermodynamics of iron-carbon alloys). Moscow, Metallurgiya, 1972, 328 p. (in Russ.).
11. Agren J.A. Thermodynamic Analysis of the Fe–C and Fe–N Phase Diagrams. *Metal. Trans.*, 1979, Vol. 10, Issue 12, pp. 1847–1852. DOI: 10.1007/BF02811728
12. Harvig H. En An Extended Version of the Regular Solution Model for Stoichiometric Phases and Ionic Melts. *Acta Chemica Scandinavica*, 1971, Vol. 25, pp. 3199–3204. DOI: 10.3891/acta.chem.scand.25-3199
13. Zener C. Kinetics of the decomposition of austenite. *Trans. AIME*, 1946, Vol. 167, pp. 550–595.
14. Vonsovskiy S.V. *Ferromagnetizm* (Ferromagnetism). Moscow, Nauka Publ., 1971, 1032 p. (in Russ.).
15. Khachaturyan A.G. *Theory of structural phase transformations in solids*. John Willey, New York, 1983, Vol. 17, pp. 1733–1743.
16. Mirzayev D.A., Mirzoev A.A., Chirkov P.V. Ordering of Carbon Atoms in Free Martensite Crystals and When Enclosed in Elastic Matrix. *Metallurgical and Materials Transactions A*, 2016, Vol. 47, no. 2, pp. 637–640. DOI: 10.1007/s11661-015-3258-9

Received September 21, 2017

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОДОЛЬНОЙ КОМПОНЕНТЫ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЕ

И.В. Свиридова, М.А. Дрязгов, А.Е. Коренченко, Э.А. Бибилова

Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: korenchenkoa@susu.ru

Рассмотрены оптические явления, связанные с влиянием продольной (т. е. направленной параллельно волновому вектору) компоненты электрического поля в электромагнитной волне. Актуальность работы связана с исследованием объектов субволновых масштабов и дополнительных степеней свободы пространственно-неоднородных оптических полей в новых областях оптики – фотонике, плазмонике и нанооптике. Численный анализ проведен для плоских волн с гауссовым профилем интенсивности и однородной (линейной или круговой) поляризацией. Решение уравнений Максвелла проведено методом конечных разностей. Для тестирования точности программы проведено сравнение коэффициентов отражения электромагнитной волны на границе прозрачной диэлектрической среды с аналитическим решением Френеля. Проведен расчет распределения электромагнитного поля при фокусировке толстой симметричной линзой. Получено увеличение интенсивности продольной компоненты в фокальной плоскости линзы в ~ 25 раз по сравнению с величиной E_{\parallel} в падающем излучении. Впервые проведен численный анализ геометрического спинового эффекта Холла при фокусировке асимметрично сходящегося светового пучка. Эффект состоит в смещении «центра тяжести» распределения интенсивности продольной компоненты светового пучка для различных состояний круговой поляризации. Рассчитанный сдвиг составил $\sim 0,5\lambda$ для право- и левополяризованного света при диаметре фокального пятна $\sim 2\lambda$, что хорошо согласуется с экспериментальными данными. Проведенные исследования показали, что разработанный пакет может быть использован для расчетов распределения полей при распространении электромагнитных волн произвольной конфигурации в оптически неоднородных средах.

Ключевые слова: спин-орбитальное взаимодействие; продольная компонента поля; геометрический спиновый эффект Холла.

Введение

Волновое уравнение для электрического $\mathbf{E} = \{E_x, E_y, E_z\}$ и магнитного $\mathbf{H} = \{H_x, H_y, H_z\}$ полей в электромагнитной волне (ЭМВ) выводится из системы уравнений Максвелла на основании параксиального приближения $|\partial^2 H_z / \partial x^2| \gg |k_x \partial H_z / \partial x|$, здесь $k_x = 2\pi/\lambda$ – составляющая волнового вектора $\mathbf{k} = \{k_x, 0, 0\}$, волна распространяется вдоль оси x . Следствием применения параксиального приближения является утверждение, что векторы напряженности электрического и магнитного полей лежат в плоскости фронта волны, то есть электромагнитные волны поперечны. Однако, как показано в [1], данное приближение верно только для пучков с «крупной», в сравнении с λ , пространственной неоднородностью интенсивности. Для демонстрации этого утверждения запишем уравнения Максвелла для системы, в которой волна, среда и все оптические элементы однородны и бесконечны вдоль оси z . В этом случае все производные по z равны 0 и для волны, распространяющейся вдоль оси x , система имеет вид:

$$\frac{\partial E_y}{\partial t} = -\frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \frac{\partial H_z}{\partial x}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{1}{\mu\mu_0} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right), \quad (2)$$

$$\frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \frac{\partial H_z}{\partial y}. \quad (3)$$

Из (3) следует, что продольная компонента E_x равна нулю лишь для бесконечной плоской волны с однородным профилем интенсивности. Если распределение интенсивности в поперечном сечении пучка не является однородным, т. е. $\partial H_z/\partial y \neq 0$, то такая ЭМВ содержит продольную компоненту, причем тем большую, чем больше $\partial H_z/\partial y$. Таким образом, чем сильнее поперечная неоднородность электромагнитного поля, тем больше продольная компонента, и, значит, рассмотрение субволновых масштабов в оптике выходит за рамки парааксиального приближения.

Как показано в работе [2], продольная компонента может влиять на остроту фокусировки пучка, которая имеет значение во многих областях: фотолитография, оптические диски памяти, конфокальная микроскопия, оптическая манипуляция, высокоразрешающая метрология, ускорение электронов. Диаметр фокального пятна при острой фокусировке света зависит от вида поляризации и от фокусирующего оптического элемента. Для гауссова пучка световое пятно получается уширенным из-за вклада продольной компоненты [3]. Однако в случае пучка с Бесселевым распределением преобладание продольной компоненты в фокальной плоскости способствует сужению пучка и вытягиванию фокуса вдоль направления распространения [4].

В настоящее время все больший интерес представляет исследование объектов субволновых масштабов и дополнительных степеней свободы пространственно-неоднородных оптических полей. Свет обладает собственными степенями свободы, которые связаны с осциллирующими во времени электрическим и магнитным полями. В квантовом рассмотрении правая и левая круговые поляризации электрического и магнитного поля соответствуют двум спиновым состояниям фотонов. Спиновые и орбитальные свойства световых пучков связаны друг с другом. Эту связь принято называть спин-орбитальным взаимодействием или оптическим спиновым эффектом Холла.

Поляризация света влияет на траекторию его распространения и, наоборот, траектория оказывает влияние на поляризацию [5]. Так, при смене знака циркулярности поляризованного по кругу асимметрично сходящегося пучка происходит сдвиг «центра тяжести» продольной компоненты ЭМВ в направлении, перпендикулярном оси распространения света. Величина сдвига мала и составляет значение порядка радиуса перетяжки пучка. Этот эффект был изучен теоретически и экспериментально [6, 7], однако его численный анализ, насколько нам известно, не проводился.

Цель работы состоит в разработке программного пакета для анализа продольной компоненты электрического поля при взаимодействии ЭМВ с различными оптическими элементами и численном исследовании явления поперечного сдвига «центра тяжести» продольной компоненты при прохождении лево- или право-поляризованной ЭМВ через половину линзы.

Математическая модель

Пусть световой пучок распространяется в немагнитной среде, не содержащей зарядов и токов. Система уравнений Максвелла в этом случае записывается в виде:

$$\frac{\partial H_x}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right), \quad (4) \quad \frac{\partial E_x}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \left(\frac{\partial H_z}{\partial y} - \frac{\partial H_y}{\partial z} \right), \quad (7)$$

$$\frac{\partial H_y}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \left(\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x} \right), \quad (5) \quad \frac{\partial E_y}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \left(\frac{\partial H_x}{\partial z} - \frac{\partial H_z}{\partial x} \right), \quad (8)$$

$$\frac{\partial H_z}{\partial t} = -\frac{1}{\mu_0} \left(\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right), \quad (6) \quad \frac{\partial E_z}{\partial t} = \frac{1}{\epsilon\epsilon_0} \left(\frac{\partial H_y}{\partial x} - \frac{\partial H_x}{\partial y} \right). \quad (9)$$

Для численного решения системы (4)–(9) использовался метод конечных разностей во временной области (FDTD-подход) [8]. Вычислительный объем представлял собой прямоугольный параллелепипед с размерами $40\lambda \times 40\lambda \times 100\lambda$. На границах помещалась специальная поглощающая среда (далее PML), оптические параметры которой были подобраны таким образом, чтобы предотвратить отражение света обратно в объем и обеспечить полное поглощение преломленного пучка внутри PML [9]. Расчеты проводились для различных пространственных разбиений и временных шагов, и было получено независимое от параметров сетки решение. Параметры моде-

лирования: длина волны излучения $\lambda = 0,5$ мкм, толщина поглощающего слоя PML $\sim \lambda$. Алгоритм был протестирован с помощью задачи об отражении/преломлении света на границе вакуум-диэлектрик. Вычисления проводились на суперкомпьютере Торнадо (ЮУрГУ).

Проверка выполнения формул Френеля

Для проверки достоверности результатов расчетов было смоделировано падение электромагнитной волны на плоскую границу прозрачной диэлектрической среды. Коэффициенты отражения и преломления в этом случае могут быть вычислены аналитически с помощью формул Френеля.

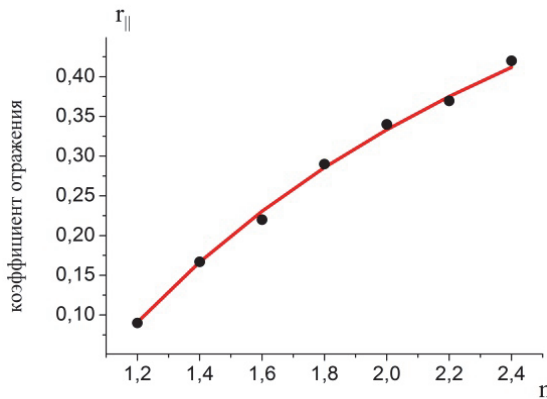


Рис. 1а. Зависимость коэффициента отражения света от показателя преломления среды при нормальном падении

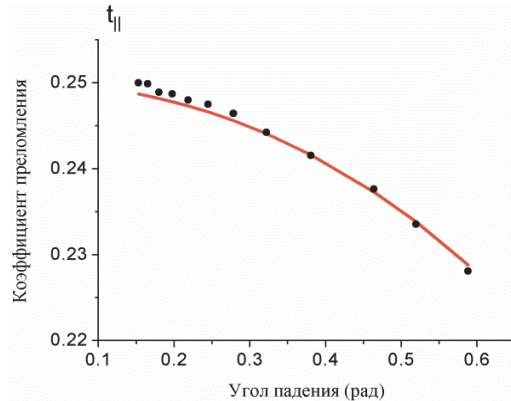


Рис. 1б. Зависимость коэффициента преломления света от угла падения; $n = 1,5$

• – расчет в программе FDTD-методом; — – расчет по формулам Френеля

На рис. 1, а и б показаны результаты тестовых расчетов. На рис. 1, а изображена зависимость коэффициента отражения ЭМВ от показателя преломления среды при нормальном падении, на рис. 1, б показана зависимость коэффициента преломления света от угла падения при фиксированном показателе преломления ($n = 1,5$). Как видно из рисунков, результаты численного эксперимента хорошо согласуются с теоретическими значениями, погрешность составила менее 3 %, что говорит о высокой точности применяемого метода.

Исследование продольной составляющей электрического поля для плоско- и циркулярно-поляризованных электромагнитных волн, распространяющихся в вакууме

На рис. 2 показана интенсивность поперечной E_y (левая шкала) и продольной E_x (правая шкала) компонент электрического поля при распространении в вакууме линейно-поляризованного гауссова светового пучка. По оси абсцисс графика отложено расстояние от центра пучка вдоль оси y , выраженное в длинах волн, по оси ординат отложена интенсивность в условных единицах. Полуширина пучка по $1/e$ – спаду интенсивности (FWHM) на входе в вычислительный объем составляла 5λ . Как видно из рисунка, интенсивность поперечной компоненты в ~ 1000 раз превышает интенсивность продольной, это позволяет пренебрегать вкладом E_x в параксиальном приближении при описании, например, мод лазера. Интенсивность продольной компоненты излучения имеет вид двугорбой кривой, максимумы которой соответствуют наибольшим значениям $\partial H_z / \partial y$.

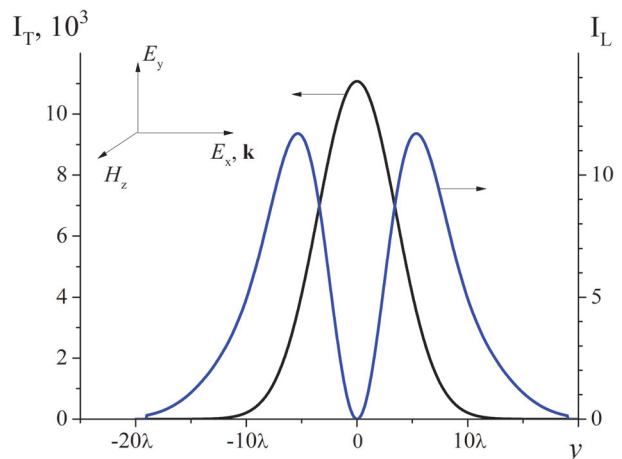


Рис. 2. Интенсивность в условных единицах поперечной (шкала слева) и продольной компоненты (шкала справа) при распространении линейно-поляризованного излучения Гауссова профиля в изотропной однородной среде

При распространении такой же волны, но с циркулярной поляризацией, в пространстве наблюдалась динамическая картина изменения

продольной компоненты, показанная на рис. 3. Каждая картинка на рисунке представляет собой мгновенное распределение модуля E_x в поперечном сечении пучка. Зачерненные участки картинок соответствуют наибольшим значениям продольного поля (по модулю). Как видно из рисунка, картина продольного поля поворачивается со временем, это связано с вращением вектора магнитного поля. Распределение интенсивности продольной компоненты было рассчитано из этих данных усреднением по времени и качественно совпало с данными работы [10].

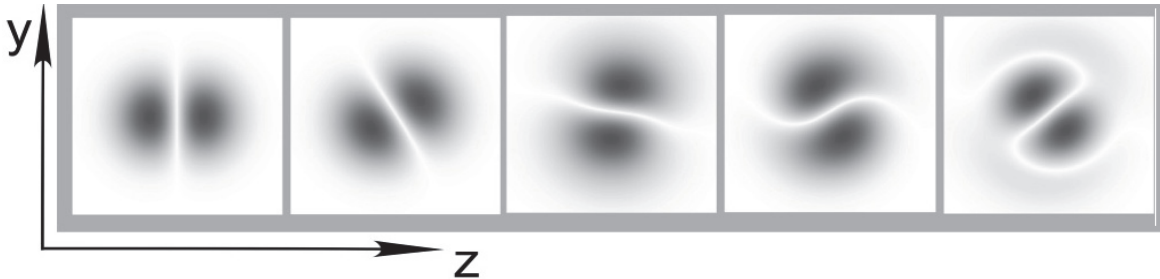


Рис. 3. Временная эволюция мгновенных распределений модуля продольной компоненты электрического поля для циркулярно-поляризованного гауссового пучка

Исследование продольной составляющей при прохождении плоско-поляризованной электромагнитной волны через линзу

Для исследования возможностей пакета в вычислительный объем была помещена плоско-выпуклая линза. Материал линзы имел показатель преломления $n = 2$, радиус сферической поверхности составлял $\sim 50\lambda$, толщина линзы в самом широком месте $\sim 5\lambda$, рассчитанное фокусное расстояние было равно 10 мкм, что составляло 20λ . Линейно поляризованная плоская ЭМВ с гауссовым профилем интенсивности падала нормально на плоскую поверхность линзы. Радиус сгенерированного падающего пучка, определенный, как полуширина пучка по критерию $1/e$, был равен 5λ .

На рис. 4 показан график зависимости радиуса пучка от расстояния до линзы. Как видно из графика, линза формирует протяженный ($\sim 2\lambda$) фокус с субволновым поперечным размером $\sim 0,5\lambda$. Значение продольной компоненты зависит от степени неоднородности распределения интенсивности светового пучка, поэтому в фокальной плоскости линзы, в зоне, где пучок имеет наименьший радиус, продольная компонента должна возрастать. Как и ожидалось, соотношение интенсивностей продольной и поперечной компонент электрического поля в перетяжке составило ~ 40 (см. вкладку рис. 4), тогда как в падающем пучке это отношение составляло 1000 (рис. 1).

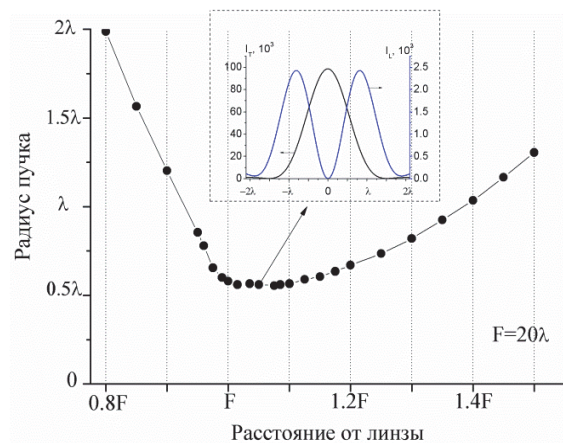


Рис. 4. Фокусировка светового пучка. Зависимость радиуса пучка от расстояния от линзы

Изучение продольной компоненты электромагнитной волны на границе диэлектрик-вакуум

При изучении прохождения электромагнитной волны через линзу был замечен скачок продольной компоненты на границе диэлектрик-вакуум (со стороны сферической поверхности линзы). Схема эксперимента представлена на вкладке рис. 5. В плоскости, показанной на схеме, проводился расчет компонент электрического поля и усреднение квадратов их значений. Скачок возникает при переходе из материала линзы в воздух и связан с локальной поперечной неоднородностью диэлектрической проницаемости при выходе из линзы. Из рис. 5 видно, что как поперечная, так и продольная компоненты электрического поля реагируют на неоднородность среды резким локализованным скачком. Интерес представляет также интерференционная картина, возникающая внутри линзы. Колебания интенсивности в интерференционной картине показаны на

рис. 5 слева и возникают при сложении падающей и отраженной от внутренней поверхности линзы волн.

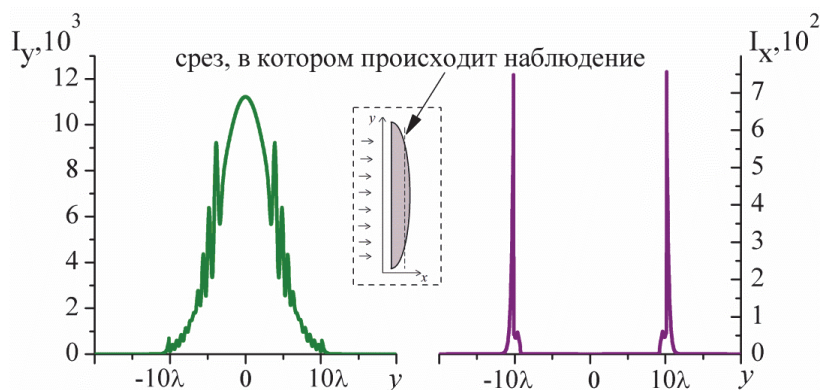


Рис. 5. Поперечное распределение интенсивности компонент электрического поля. Интерференционная картина внутри линзы (слева) и локальный скачок интенсивности на границе диэлектрик-вакуум (справа)

Исследование сдвига «центра тяжести» продольной компоненты электромагнитной волны

В рамках создания универсального пакета для исследования взаимодействия ЭМВ с различными оптическими элементами была создана численная модель эксперимента, описанного в работе [7]. Геометрический спиновый эффект Холла – оптическое явление, демонстрирующее спин-орбитальное взаимодействие в световом пучке и заключающееся во влиянии состояния поляризации света на траекторию пучка. Для создания светового пучка в вычислительный объем помещалась половина линзы. Полученный асимметричный пучок обладал ненулевым орбитальным моментом. Спин-орбитальное взаимодействие приводило к тому, что траектории пучка для право- и лево-поляризованного света отличались друг от друга, что становилось особенно заметно в фокальной плоскости линзы. Анализ результатов численного эксперимента показал, что радиус перетяжки составил величину, примерно равную длине волны $\sim \lambda$, а в зоне фокуса было замечено смещение центра тяжести продольной компоненты пучка от первоначального направления на $\sim 0,45\lambda$ влево для левоциркулярно поляризованного пучка и на $\sim 0,47\lambda$ для правоциркулярно поляризованного пучка. На рис. 6 заметно смещение центра тяжести продольной компоненты пучка от первоначального положения, отмеченного вертикальной прямой, в плоскости, перпендикулярной распространению волны. Этот результат хорошо соотносится с экспериментальными результатами [7], что говорит о точности созданной программы и о том, что геометрический спиновый эффект Холла возможно получить численно решением уравнений классической электродинамики.

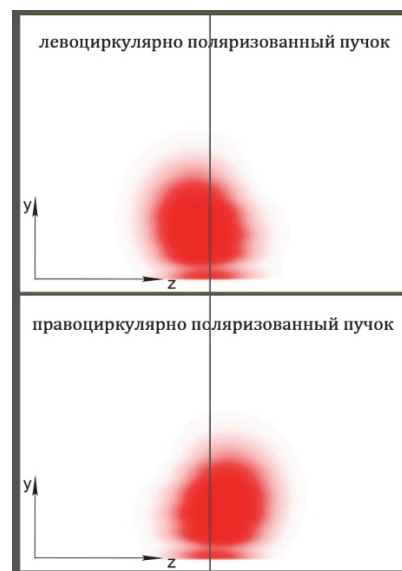


Рис. 6. Интенсивность продольной компоненты излучения в фокальной плоскости для пучков с различными спиновыми состояниями. Видно отклонение пучков от направления первоначального распространения, связанное со спиновым эффектом Холла

Заключение

Таким образом, в работе описан пакет программ для численного решения уравнений Максвелла, разработанный на основе метода FDTD. Пакет позволяет моделировать взаимодействие ЭМ излучения в оптическом диапазоне с различными оптическими элементами. Проведено тестирование пакета на основе сравнения коэффициентов отражения и преломления при падении ЭМВ на диэлектрическую среду с результатами применения формул Френеля. Получено хорошее согласие численных и аналитических данных, погрешность не превышала 3%. С использованием разработанного пакета проведено численное исследование продольной компоненты электрического поля и получены следующие результаты:

1. Анализ фокусировки светового пучка с помощью простой оптической линзы показал возрастание амплитуды продольной компоненты электрического поля в ЭМВ в ~ 25 раз в области

перетяжки. На границе диэлектрик-вакуум было замечено локальное возрастание продольной компоненты до величин, сопоставимых с поперечной компонентой. Эффекты связаны с возрастанием степени неоднородности поперечного распределения интенсивности светового пучка.

2. Впервые численно изучен геометрический спиновый эффект Холла. Наблюдалось отклонение центра тяжести продольной компоненты асимметричного пучка от первоначального направления для пучков с право и лево-циркулярной поляризацией. Рассчитанный сдвиг пучка в фокальной плоскости половины линзы, создающей асимметричный пучок, составил $\sim \lambda/2$ при радиусе фокальной перетяжки примерно равном λ , что хорошо согласуется с литературными данными [6, 7].

Работа выполнена в рамках темы государственного задания № 0389-2014-0030.

Литература

1. Lax, M. From Maxwell to paraxial wave optics / M. Lax, W.H. Louisell, W.B. McKnight // *Physical Review A*. – 1975. – Vol. 11, № 4. – P. 1365–1370.
2. Hao, B. Experimental measurement of longitudinal component in the vicinity of focused radially polarized beam / B. Hao, J. Leger // *Optics Express*. – 2007. – Vol. 15, № 6. – P. 3550–3556.
3. Quabis, S. Focusing light to a tighter spot / S. Quabis, R. Dorn, M. Eberler // *Optics Communications*. – 2000. – Vol. 179, № 1. – P. 1–7.
4. Khonina, S.N. Analysis of the formation of a longitudinally polarized optical needle by a lens and axicon under tightly focused conditions / S.N. Khonina, S.A. Degtyarev // *Journal of Optical Technology*. – 2016. – Vol. 83, № 4. – P. 197–205.
5. Bliokh, K.Y. Spin-orbit interactions of light / K.Y. Bliokh, F.J. Rodríguez-Fortuño, F. Nori, A.V. Zayats // *Nature Photonics*. – 2015. – Vol. 9, № 12. – P. 796–808.
6. Baranova, N.B. Transverse shift of a focal spot due to switching of the sign of circular polarization / N.B. Baranova // *JETP Letters*. – 1994. – Vol. 59. – P. 216–218.
7. Зельдович, Б.Я. Наблюдение поперечного сдвига фокальной перетяжки при смене знака циркулярной поляризации / Б.Я. Зельдович, Н.Д. Кундикова, Л.Ф. Рогачева // *Письма в ЖЭТФ*. – 1994. – Т. 59. – С. 737.
8. Yee, K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media / K. Yee // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*. – 1996. – Vol. 14, № 3. – P. 302–307.
9. Berenger, J.-P. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves / J.-P. Berenger // *Optics Communications*. – 1994. – Vol. 114, № 2. – P. 185–200.
10. Nieminen, T.A. Angular momentum of a strongly focused Gaussian beam / T. A. Nieminen, A.B. Stilgoe // *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics*. – 2008. – Vol. 10, no. 11. – P. 115005.

Поступила в редакцию 4 августа 2017 г.

NUMERICAL ANALYSIS OF THE LONGITUDINAL COMPONENT OF ELECTRIC FIELD IN ELECTROMAGNETIC WAVE

I.V. Sviridova, M.A. Dryazgov, A.E. Korenchenko, E.A. Bibikova

*South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation
E-mail: korenchenkoae@susu.ru*

Optical phenomena connected with the influence of the longitudinal component (i.e. parallel to the wave vector) of the electric field in electromagnetic wave are considered. The topicality of the study is connected with the analysis of the objects of subwave scales and additional degrees of freedom of

spatially inhomogeneous optical fields in new areas of optics; they are photonics, plasmonics and nanooptics. The numerical analysis is carried out for plane waves with Gauss intensity profile and homogeneous (linear or circular) polarization. The solution of Maxwell equations is carried by the method of finite differences. To test the accuracy of the program the reflection coefficients of an electromagnetic wave on the boundary of a transparent dielectric medium with analytic Fresnel solution are compared. The distribution of the electromagnetic field at focusing with a thick symmetrical lens is calculated. The increase in the intensity of the longitudinal component in the focal plane of the lens is found to be ~ 25 fold compared with the value of E_{\parallel} in the incident radiation. A numerical analysis of the geometric spin Hall effect is carried out for the first time when focusing an asymmetrically converging light beam. The effect is in shifting the center of gravity of the intensity distribution of the longitudinal component of the light beam for different states of circular polarization. The calculated shift is $\sim 0,5\lambda$ for right-handed and left polarized light with a focal spot diameter of $\sim 2\lambda$ which agrees with experimental data well. Carried out research has shown that the developed package can be used to calculate field distribution in the propagation of electromagnetic waves of arbitrary configuration in optically inhomogeneous media.

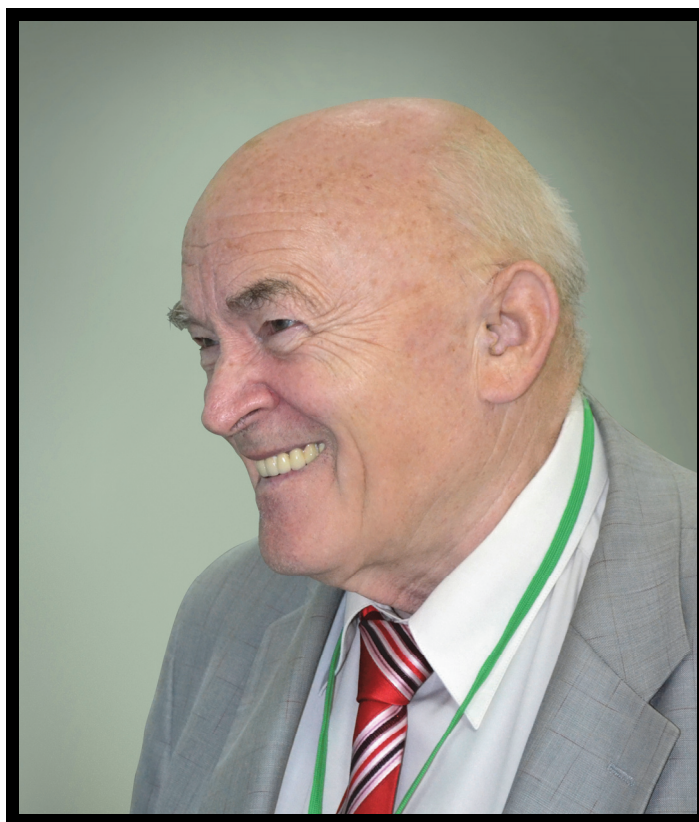
Keywords: spin-orbital interaction; longitudinal component of the field; geometric spin Hall effect.

References

1. Lax M., Louisell W.H., McKnight W.B. From Maxwell to paraxial wave optics. *Physical Review A*, 1975, Vol. 11, no 4, pp. 1365–1370. DOI: 10.1103/PhysRevA.11.1365
2. Hao B., Leger J. Experimental measurement of longitudinal component in the vicinity of focused radially polarized beam. *Optics Express*, 2007, Vol. 15, no. 6, pp. 3550–3556. DOI:10.1364/OE.15.003550
3. Quabis S., Dorn R., Eberler M. Focusing light to a tighter spot. *Optics Communications*, 2000, Vol. 179, no. 1, pp. 1–7. DOI: 10.1016/S0030-4018(99)00729-4
4. Khonina S.N., Degtyarev S.A. Analysis of the formation of a longitudinally polarized optical needle by a lens and axicon under tightly focused conditions. *Journal of Optical Technology*, 2016, Vol. 83, no. 4, p. 197–205. DOI: 10.1364/JOT.83.000197
5. Bliokh K.Y., Rodríguez-Fortuño F.J., Nori F., Zayats A.V. Spin-orbit interactions of light. *Nature Photonics*, 2015, Vol. 9, no. 12, pp. 796–808. DOI: 10.1038/nphoton.2015.201
6. Baranova N.B. Transverse shift of a focal spot due to switching of the sign of circular polarization. *JETP Letters*, 1994, Vol. 59, pp. 216–218.
7. Zeldovich B.Y. Kundikova N.D. Observation of the transverse shift of the focal waist when the sign of the circular polarization is changing. *JETP Letters*, 1994, Vol. 59, p. 737.
8. Yee K. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell's equations in isotropic media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 1996, Vol. 14, no. 3, pp. 302–307. DOI: 10.1109/TAP.1966.1138693
9. Berenger J.-P. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *Optics Communications*, 1994, Vol. 114, no. 2, pp. 185–200. DOI: 10.1006/jcph.1994.1159
10. Nieminen T.A., Stilgoe A.B. Angular momentum of a strongly focused Gaussian beam. *Journal of Optics A: Pure and Applied Optics*, 2008, Vol. 10, no. 11, pp. 115005. DOI: 10.1088/1464-4258/10/11/115005

Received August 4, 2017

ОТ РЕДАКЦИОННОЙ КОЛЛЕГИИ



13 октября 2017 года ушел из жизни Валентин Федорович Куропатенко – выдающийся ученый, автор одного из четырех известных в мире методов расчета ударных волн – метода Куропатенко, орденосец, лауреат Государственной премии СССР, заслуженный деятель науки Российской Федерации, действительный член Международной академии информатизации, член Российского национального комитета по теоретической и прикладной механике. Редакционная коллегия научного журнала «Вестник ЮУрГУ. Серия Математика. Механика. Физика», в котором Валентин Федорович неоднократно публиковал свои работы и рецензировал статьи других авторов, выражает свои искренние соболезнования родным, близким и соратникам. Глубоко скорбим о невозможной утрате. Память о Валентине Федоровиче Куропатенко навсегда сохранится в сердцах тех, кому посчастливилось знать этого талантливого ученого и замечательного человека.

Серия основана в 2009 году.

Свидетельство о регистрации ПИ № ФС77-57362 выдано 24 марта 2014 г. Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций.

Решением Президиума Высшей аттестационной комиссии Министерства образования и науки Российской Федерации журнал включен в «Перечень ведущих рецензируемых научных журналов и изданий, в которых должны быть опубликованы основные научные результаты диссертаций на соискание ученых степеней доктора и кандидата наук» по следующим отраслям наук и группам специальностей: 01.01.00 – математика; 01.02.00 – механика; 01.04.00 – физика, 05.13.00 – Информатика, вычислительная техника и управление.

Журнал включен в Реферативный журнал и Базы данных ВИНТИ. Сведения о журнале ежегодно публикуются в международных справочных системах по периодическим и продолжающимся изданиям “Ulrich’s Periodicals Directory”, “Zentralblatt MATH”.

Подписной индекс 29211 в объединенном каталоге «Пресса России», E29211 в Интернет-каталоге агентства «Книга-Сервис».

Периодичность выхода – 4 номера в год.

ТРЕБОВАНИЯ К ПУБЛИКАЦИИ СТАТЬИ

1. Публикуются оригинальные работы, содержащие существенные научные результаты, не опубликованные в других изданиях, прошедшие этап научной экспертизы и соответствующие требованиям к подготовке рукописей.

2. В редакцию предоставляется электронная (документ MS Word 2003) версия работы объемом не более 6 страниц, экспертное заключение о возможности опубликования работы в открытой печати, сведения об авторах (Ф.И.О., место работы, звание и должность для всех авторов работы), контактная информация ответственного за подготовку рукописи.

3. Структура статьи: УДК, название (не более 12–15 слов), список авторов, аннотация (150–250 слов), список ключевых слов, текст работы, литература (в порядке цитирования, в скобках, если это возможно, дается ссылка на оригинал переводной книги или статьи из журнала, переводящегося на английский язык). После текста работы следует название, расширенная аннотация (реферат статьи) объемом до 1800 знаков с пробелами, список ключевых слов и сведения об авторах на английском языке.

4. Параметры набора. Поля: зеркальные, верхнее – 23, нижнее – 23, внутри – 22, снаружи – 25 мм. Шрифт – Times New Roman 11 pt, масштаб 100 %, интервал – обычный, без смещения и анимации. Отступ красной строки 0,7 см, интервал между абзацами 0 пт, межстрочный интервал – одинарный.

5. Формулы. Стиль математический (цифры, функции и текст – прямой шрифт, переменные – курсив), основной шрифт – Times New Roman 11 pt, показатели степени 71 % и 58 %. Выключенные формулы должны быть выровнены по центру.

6. Рисунки все черно-белые. Желательно предоставить рисунки и в виде отдельных файлов.

7. Адрес редакции журнала «Вестник ЮУрГУ» серии «Математика. Механика. Физика»:

Россия 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76, Южно-Уральский государственный университет, факультет математики, механики и компьютерных технологий, кафедра математического и компьютерного моделирования, главному редактору профессору Загребинной Софье Александровне. [Prof. Zagrebina Sophiya Aleksandrovna, Mathematical and Computer Modeling Department, SUSU, 76, Lenin prospekt, Chelyabinsk, Russia, 454080].

8. Адрес электронной почты: mmph@susu.ru

9. Полную версию правил подготовки рукописей и пример оформления можно загрузить с сайта журнала: см. <http://vestnik.susu.ru/mmph>.

10. Журнал распространяется по подписке. Электронная версия: см. www.elibrary.ru, <http://vestnik.susu.ru/mmph>, <http://вестник.юургу.рф/mmph>.

11. Плата с аспирантов за публикацию не взимается.

Редактор *О. Шаханская, А. Полякова*

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 24.10.2017. Дата выхода в свет 31.10.2017.

Формат 60×84 1/8. Печать цифровая. Усл. печ. л. 9,76.

Тираж 500 экз. Заказ 343/581. Цена свободная.

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ. 454080, г. Челябинск, пр. им. В.И. Ленина, 76.