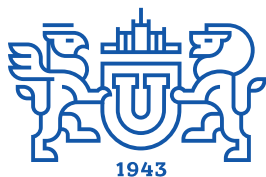


ВЕСТНИК



**ЮЖНО-УРАЛЬСКОГО
ГОСУДАРСТВЕННОГО
УНИВЕРСИТЕТА**

**2018
Т. 10, № 1**

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)»**

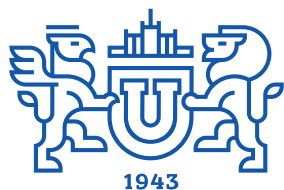
Основной целью серии «Математика. Механика. Физика» является публикация и распространение оригинальных результатов научных исследований в области математики, механики и физики, а также их приложений в естественных, технических и экономических науках.

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 **Гуйдетти 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

2018

Vol. 10, no. 1

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

- OKHLUPINA O.V. Description of some Weighted Exponential Classes of Subharmonic Functions..... 5
- ТАГИЕВ Р.К., КАСЫМОВА Р.С. Вариационный метод решения коэффициентной обратной задачи для эллиптического уравнения..... 12
- ТУРСУНОВ Д.А., АЛЫМКУЛОВ К., АЗИМОВ Б.А. Асимптотика решения сингулярно возмущенной задачи Дирихле со слабой особой точкой..... 21

Механика

- КОРОТКИЙ А.И., ЦЕПЕЛЕВ И.А. Восстановление параметров течения вязкой теплопроводной жидкости по некоторым измерениям на ее поверхности..... 27
- МАРКОВ Е.В., ПУЛЬНИКОВ С.А., ГЕРБЕР А.Д. Разработка математической модели массопереноса компонент водно-солевого раствора в пучинистых грунтах на основании кинетической теории жидкостей..... 37
- ЯУШЕВ А.А., ТАРАНЕНКО П.А., ЖЕСТКОВ А.В., ЛОГИНОВСКИЙ В.А. Расчетно-экспериментальное исследование частот и форм собственных колебаний сварного корпуса кориолисового расходомера 45

Физика

- БЕХТЕРЕВ А.Н., ЛЕДНОВ А.Ю., САВИНОВА Н.А. Выбор параметров цифровых фильтров при спектрофотометрических исследованиях..... 52
- ГУРЕВИЧ С.Ю., ПЕТРОВ Ю.В., ГОЛУБЕВ Е.В. Метод локального измерения толщины тонких металлоизделий с помощью ультразвука 58
- DYURYAGINA N.S., YALOVETS A.P. Population Kinetics of Localized States in Nanocomposite Materials under Exposure to Radiation 62
- ЛАТЫПОВ К.Ф., ДОЛОМАТОВ М.Ю., БАХТИЗИН Р.З. Определение сродства к электрону гетероциклических молекулярных полупроводников по автокорреляционным параметрам спектров оптического поглощения 72

CONTENTS

Mathematics

- OKHLUPINA O.V. Description of some Exponential Weight's Classes of Subharmonic Functions 5
- TAGIEV R.K., KASYMOVA R.S. Variational Method of Solving a Coefficient Inverse Problem for an Elliptic Equation..... 12
- TURSUNOV D.A., ALYMKULOV K., AZIMOV B.A. Asymptotics of Solution of the Singularly Perturbed Dirichlet Problem with a Weak Critical Point..... 21

Mechanics

- KOROTKII A.I., TSEPELEV I.A. Recovery of Flow Parameters of Viscous Heat-Conducting Fluid by Some Changes at its Surface 27
- MARKOV E.V., PULNIKOV S.A., GERBER A.D. Development of Mathematical Model of Component Mass Transfer of Water-Salt Solution in Heaving Soils based on the Kinetic Theory of Liquids 37
- YAUSHEV A.A., TARANENKO P.A., ZHESTKOV A.V., LOGINOVSKIY V.A. Computational and Experimental Study of Frequencies and Natural Mode of Welded Shell of Coriolis Flowmeter. 45

Physics

- BEKHTEREV A.N., LEDNOV A.Yu., SAVINOVA N.A. Selecting Parameters of Digital Filters During Spectrophotometric Research 52
- GUREVICH S.Yu., PETROV Yu.V., GOLUBEV E.V. Method of Local Measurement of Thickness of Thin Metal Products using Ultrasound 58
- DYURYAGINA N.S., YALOVETS A.P. Population Kinetics of Localized States in Nanocomposite Materials under Exposure to Radiation 76
- LATYPOV K.F., DOLOMATOV M.Yu., BAKHTIZIN R.Z. Defining of Electron Affinity of Heterocyclic Molecular Semiconductors as per Autocorrelation Parameters of Optical Absorption Spectra 72

DESCRIPTION OF SOME WEIGHTED EXPONENTIAL CLASSES OF SUBHARMONIC FUNCTIONS

O.V. Okhlupina

Bryansk State engineering-technological University, Bryansk, Russian Federation

E-mail: helga131081@yandex.ru

The role of subharmonic functions in such sections of analysis as complex and real analysis is very significant. Such classes of functions are closely related to analytic harmonic functions and make an important contribution to the general theory of potential and mathematical physics. In the works of R. Nevanlinna and W. Heiman, parametric representations of subharmonic classes in the plane of functions, whose characteristic has a power growth at infinity, are obtained. The question of whether similar representations are true for weighted classes that admit a stronger growth at infinity (for example, the exponential growth) arises in the theory of entire and meromorphic functions. In this article, classes of subharmonic functions with Nevanlinna characteristic that is summable with exponential weight in a complex plane are introduced for consideration, and the representing measures of functions of such classes are studied. When proving the results, methods of complex and functional analysis are used. An important role in the study is played by potentials based on the factors of the modified Weierstrass product. The proof of the main result is based on the use of auxiliary assertions formulated in the form of lemmas.

Keywords: subharmonic function; harmonic function; representing measures; the Nevanlinna's characteristic.

Introduction

Let C be the complex plane. $SH_{\alpha,\sigma}(C)$ (σ, α are positive numbers) be the class of subharmonic functions u in C such that $\int_1^{+\infty} T(r,u)e^{-\sigma r^\alpha} dr < +\infty$, where $T(r,u)$ is the Nevanlinna's characteristic of

subharmonic function u , that is $T(r,u) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} u^+(r \cos \varphi, r \sin \varphi) d\varphi$, $u^+ = \max(u, 0)$ (see [1–4]).

In complex and real analysis, potential theory and mathematical physics the value of subharmonic functions is very significant (see [1–3, 5]). In the works R. Nevanlinna and W. Hayman (e.g., see [1]) the obtained definition of a class of subharmonic in the plane of the functions, the characteristics of which have exponential growth at infinity. The question of whether faithful same parametric representation for the weight classes, allowing for stronger growth at infinity, say exponential growth, occurs in the theory of entire and meromorphic functions (see [6]).

This paper studied the representing measures of the functions of class $SH_{\alpha,\sigma}(C)$, as well as the necessary and sufficient condition for such measures.

Statement of the main result

Let $\sigma, \alpha > 0$, $z, \zeta \in C$, $\zeta \neq 0$, $p(|\zeta|) = \max[\sigma|\zeta|^\alpha, 1]$, where $[a]$ is the integer part of a real number a .

$A_p(z, \zeta) = \left(1 - \frac{z}{\zeta}\right) \exp\left(\sum_{j=1}^{p(|\zeta|)} \frac{1}{j} \left(\frac{z}{\zeta}\right)^j\right)$ is a factor of the modified product by K. Weierstrass (see [7, 8]).

Theorem 1. Let $u \in SH_{\alpha, \sigma}(C)$, μ is representing measure of a function u . Then μ satisfies the condition:

$$\int_1^{+\infty} \frac{n(t)e^{-\sigma t^\alpha}}{t^\alpha} dt < +\infty, \quad (1)$$

where $n(t) = \mu(D_t)$, $|z| < t$.

The opposite is also true: let μ is some non-negative Borel measure in C , satisfying the condition (1), then it is possible to build explicitly subharmonic function of class $SH_{\alpha, \sigma}(C)$, $\forall \sigma' : \sigma' > \frac{1}{e\alpha} + \sigma e^\alpha$, for which μ will be a representing measure.

Proof of auxiliary assertions

We require some auxiliary assertions for the proof of the theorem.

Lemma 1. Let $\psi(R)$ is a non-negative monotonically increasing function, for which

$$\int_1^{+\infty} \psi(x)e^{-\sigma x^\alpha} dx < +\infty, \quad (2)$$

where $\alpha > 0$. Then

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\psi(R)e^{-\sigma R^\alpha}}{R^{1-\alpha}} = 0. \quad (3)$$

Proof. The convergence of the integral (2) implies that the $\lim_{R \rightarrow +\infty} \int_R^{+\infty} \psi(x)e^{-\sigma x^\alpha} dx = 0$.

Let $\varphi(R) = \int_R^{+\infty} \psi(x)e^{-\sigma x^\alpha} dx$. It is clear that $\varphi(R) \geq \psi(R) \int_R^{+\infty} e^{-\sigma x^\alpha} dx$. We find the asymptotics of the last integral by applying the L'Hospital's rule.

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\int_R^{+\infty} e^{-\sigma x^\alpha} dx}{\frac{e^{-\sigma R^\alpha}}{R^{\alpha-1}}} = \lim_{R \rightarrow \infty} \frac{e^{-\sigma R^\alpha}}{\left(\frac{e^{-\sigma R^\alpha} \sigma R^{\alpha-1} \alpha}{R^{\alpha-1}} + \frac{e^{-\sigma R^\alpha} (\alpha-1)}{R^\alpha} \right)} = \frac{1}{\sigma \alpha}.$$

Therefore, $\lim_{R \rightarrow \infty} \frac{\psi(R)e^{-\sigma R^\alpha}}{R^{1-\alpha}} = 0$. That is $\lim_{R \rightarrow \infty} \psi(R)e^{-\sigma R^\alpha} R^{\alpha-1} = 0$.

The lemma is proved.

Lemma 2. Let $\varphi(x) = e^{-\sigma x^\alpha}$, $x \in R_+$, $R_+ = \{x \in R : x \geq 0\}$, $\varepsilon_x = \frac{1}{x^\alpha}$. Then $\varphi(x + \varepsilon_x) = e^{\varphi(x)} \cdot e^{\beta(x)}$,

where $\beta(x) = o\left(\frac{1}{x}\right)$ when $x \rightarrow +\infty$.

Proof. It follows easily from the following simple arguments. It is clear that $(1+y)^\alpha = 1 + \alpha y + o(y^2)$ when $y \rightarrow 0$. So $\sigma(x + \varepsilon_x)^\alpha = \sigma x^\alpha \left(1 + \frac{\varepsilon_x}{x}\right)^\alpha = \sigma x^\alpha + \frac{\alpha \sigma}{x} + o\left(\frac{1}{x^{\alpha+2}}\right)$ when $x \rightarrow +\infty$.

Then, $e^{\varphi(x + \varepsilon_x)} = e^{\varphi(x)} \cdot e^{\beta(x)}$, where $\beta(x) = o\left(\frac{1}{x}\right)$ when $x \rightarrow +\infty$.

The lemma is proved.

Lemma 3. Let u is an arbitrary subharmonic function in C , while it admits a representation in the form:

$$u(z) = \int_C \ln |A_p(z, \zeta)| d\mu(\zeta) + h(z),$$

$z, \zeta \in C$, $\mu(\zeta)$ is an arbitrary non-negative Borel measure in C , such that $\int_1^{+\infty} \frac{n(t)e^{-\sigma t^\alpha}}{t^\alpha} dt < +\infty$,

$n(r) = \mu(D_r)$, $\sigma > 0$, $\alpha > 0$, $h(z)$ is harmonic function in C , for which

$$\int_1^{+\infty} e^{-\sigma r^\alpha} \int_{-\pi}^{\pi} |h(re^{i\varphi})| d\varphi dr < +\infty.$$

Then $u \in SH_{\alpha, \sigma'}(C)$ when $\forall \sigma' : \sigma' > \frac{1}{e\alpha} + \sigma e^\alpha$.

Proof.

Let $V_p(z) = \int_C \ln |A_p(z, \zeta)| d\mu(\zeta)$. Then $u(z) = h(z) + V_p(z)$.

It is obvious that $h(z)$ belongs to the class under consideration. We will show that $V_p(z)$ also included in the class $SH_{\alpha, \sigma'}(C)$ for $\forall \sigma' = \sigma'(\alpha) > \sigma$.

We apply the estimate (see [1], p. 94):

$$\ln |A_p(z, \zeta)| \leq \left| \frac{z}{\zeta} \right|^{p(|\zeta|)}, \quad \zeta \neq 0, z, \zeta \in C. \tag{4}$$

Let's get that: $u(z) \leq \int_C \left| \frac{z}{\zeta} \right|^{p(|\zeta|)} d\mu(\zeta)$.

To continue the evaluation of the function, we can partition the complex plane into sets:

$$\Delta_k = \{z \in C : 2^k < |z| \leq 2^{k+1}\}, \Delta_0 = \{z \in C : |z| \leq 1\}. \text{ Then } u(z) \leq \sum_{k=0}^{+\infty} \int_{\Delta_k} \left| \frac{z}{\zeta} \right|^{p(|\zeta|)} d\mu(\zeta).$$

Each of the rings Δ_k is divided into small rings and we use Lemma 2.

Let $\delta_{k,j} = \{z \in C : 2^k + j2^{-\alpha k} < |z| \leq 2^k + (j+1)2^{-\alpha k}\}$, $0 \leq j \leq [2^{k(\alpha+1)+1}]$, where $[a]$ is the integer

part of the number a . Then $\Delta_k \subset \bigcup_{j=0}^{N_\alpha} \delta_{k,j}$, where $N_\alpha = [2^{k(\alpha+1)+1}]$.

$$\text{Therefore, } \int_{\Delta_k} \left| \frac{z}{\zeta} \right|^{p(|\zeta|)} d\mu(\zeta) \leq \sum_{j=0}^{N_\alpha} \int_{\delta_{k,j}} \left| \frac{z}{\zeta} \right|^{p(|\zeta|)} d\mu(\zeta).$$

By Lemma 2, we obtain

$$\int_{\delta_{k,j}} \left| \frac{z}{\zeta} \right|^{p(|\zeta|)} d\mu(\zeta) \leq \left| \frac{z}{\zeta^*} \right|^{p(|\zeta^*|)} d\mu(\delta_{k,j}) \leq \left| \frac{z}{\zeta^*} \right|^{p(|\zeta^*|)} n(2^k + (j+1)2^{-\alpha k}), \text{ where } \zeta^* \text{ is a point of } \delta_{k,j}.$$

$$\text{It is obvious that } \left| \frac{z}{\zeta^*} \right|^{p(|\zeta^*|)} n(2^k + (j+1)2^{-\alpha k}) \leq C_0 \int_{2^k + (j+1)2^{-\alpha k}}^{2^k + (j+2)2^{-\alpha k}} \left| \frac{z}{t} \right|^{p(|t|)} n(t) dt, \quad k = 0, 1, \dots$$

$$\text{Therefore } \int_{\Delta_k} \left| \frac{z}{\zeta} \right|^{p(|\zeta|)} d\mu(\zeta) \leq C \sum_{j=0}^{N_\alpha} \int_{\delta_{k,j}} \left| \frac{z}{t} \right|^{p(t)} n(t) dt \leq C \int_{2^k}^{2^{k+1}} \left| \frac{z}{t} \right|^{p(t)} n(t) dt.$$

Summing over k , we get:

$$u(z) \leq C \int_1^{+\infty} \left| \frac{z}{t} \right|^{p(t)} n(t) dt. \tag{5}$$

Let us estimate the last integral. According to (5) we have that

$$\int_1^{+\infty} e^{-\sigma' r^\alpha} \int_{-\pi}^{\pi} u^+(re^{i\varphi}) d\varphi dr \leq C \int_1^{+\infty} e^{-\sigma' r^\alpha} \int_1^{+\infty} \left(\frac{r}{t}\right)^{p(t)} n(t) dt dr.$$

Having established the convergence of the last integral, we prove the Lemma.

To do this, imagine the inner integral as a sum:

$$\int_1^{+\infty} \left(\frac{r}{t}\right)^{p(t)} n(t) dt = \int_1^{er} \left(\frac{r}{t}\right)^{p(t)} n(t) dt + \int_{er}^{+\infty} \left(\frac{r}{t}\right)^{p(t)} n(t) dt = I_1 + I_2.$$

Let us prove the boundedness of the second integral by a constant, independently of r . Indeed,

$$\left(\frac{r}{t}\right)^{p(t)} = \exp p(t) \ln \frac{r}{t}.$$

However, when $\frac{r}{t} \leq e^{-1}$ $\ln \frac{r}{t} \leq -1$. Then $\exp p(t) \ln \frac{r}{t} \leq \exp(-p(t))$.

$p(t) = [\sigma' t^\alpha]$, so $p(t) \geq \sigma' t^\alpha - 1$. Therefore, $\exp(-p(t)) \leq C e^{-\sigma' t^\alpha}$.

$$e^{-\sigma' t^\alpha} < \frac{e^{-\sigma t^\alpha}}{t^\alpha}, \quad \sigma' > \sigma, \quad n(t) \leq e^{\sigma t^\alpha} t^{2\alpha},$$

$$\int_{er}^{+\infty} \left(\frac{r}{t}\right)^{p(t)} n(t) dt \leq C \int_{er}^{+\infty} n(t) e^{-\sigma' t^\alpha} dt < C \int_{er}^{+\infty} \frac{n(t) e^{-\sigma t^\alpha} dt}{t^{2\alpha}} < +\infty.$$

We estimate the integral.

$$I_1 = \int_1^{er} \left(\frac{r}{t}\right)^{p(t)} n(t) dt.$$

Consider the estimate for the integral I_2 we get that

$$\int_1^{+\infty} e^{-\sigma' r^\alpha} \int_{-\pi}^{\pi} u^+(re^{i\varphi}) d\varphi \leq \int_1^{+\infty} e^{-\sigma' r^\alpha} \int_1^{er} \left(\frac{r}{t}\right)^{p(t)} n(t) dt dr.$$

To calculate the largest value of the function $\exp p(t)(\ln r - \ln t)$ on an interval $[1; er]$ we put $x = \ln r$ и $\gamma(x, t) = p(t)(x - \ln t)$.

$$\gamma'(x, t) = p'(t)(x - \ln t) - \frac{p(t)}{t} = \sigma \alpha t^{\alpha-1} (x - \ln t) - \sigma t^{\alpha-1} = \sigma \alpha t^{\alpha-1} \left(x - \ln \left(t e^{\frac{1}{\alpha}} \right) \right) = 0.$$

That is $\ln r = \ln \left(t e^{\frac{1}{\alpha}} \right)$, $t = r e^{-\frac{1}{\alpha}}$, $t^\alpha = r^\alpha e^{-1}$. This point is the maximum point, therefore

$$\gamma(x, t) = \gamma \left(x, r e^{-\frac{1}{\alpha}} \right) = p \left(r e^{-\frac{1}{\alpha}} \right) \left(\ln r - \ln r e^{-\frac{1}{\alpha}} \right).$$

Because $\max \left(\frac{r}{t} \right)^{p(t)} \leq \left(\frac{r}{r e^{-\frac{1}{\alpha}}} \right)^e$, then

$$\begin{aligned} \int_1^{er} n(t) \left(\frac{r}{t}\right)^{p(t)} dt &\leq \int_1^{er} n(t) \left(e^{\frac{1}{\alpha}}\right)^{\frac{r^\alpha}{e}} dt = \int_1^{er} n(t) e^{\frac{r^\alpha}{\alpha e}} dt = e^{\frac{r^\alpha}{\alpha e}} \int_1^{er} n(t) dt \\ &= \int_1^{+\infty} e^{-\sigma' r^\alpha} e^{\frac{r^\alpha}{\alpha e}} \int_1^{er} n(t) dt dr = \int_1^{+\infty} e^{-\left(\sigma' - \frac{1}{\alpha e}\right) r^\alpha} \int_1^{er} n(t) dt dr = \\ &= C_1 \int_1^{er} n(t) dt \cdot e^{-\left(\sigma' - \frac{1}{\alpha e}\right) r^\alpha} \Big|_1^{+\infty} + \frac{1}{\alpha} \int_1^{+\infty} \frac{e^{-\left(\sigma' - \frac{1}{\alpha e}\right) r^\alpha}}{\left(\sigma' - \frac{1}{\alpha e}\right) r^{\alpha-1}} n(er) dr. \end{aligned}$$

In view of Lemma 1, we write that $\int_1^{er} n(t) dt \leq C e^{\sigma(er)^\alpha} r^{\alpha-1}$.

Using the last estimate, we clarify the values σ' , that ensure the convergence of the integral:

$$\int_1^{+\infty} e^{-\left(\sigma' - \frac{1}{\alpha e}\right) r^\alpha} \int_1^{er} n(t) dt dr : \sigma' r^\alpha - \sigma(er)^\alpha - \frac{r^\alpha}{\alpha e} > 0, \quad r^\alpha \left(\sigma' - \sigma e^\alpha - \frac{1}{\alpha e} \right) > 0, \quad \sigma' > \frac{1}{\alpha e} + \sigma e^\alpha.$$

The lemma is proved.

Let us prove the auxiliary theorem 2.

Theorem 2. Let u is an arbitrary subharmonic function in the class $SH_{\sigma, \alpha}(C)$, $\mu(\zeta)$ is an arbitrary measure of the function u , in this case $\mu(D_t) = n(t)$, $0 < t < +\infty$. Then

$$\int_1^{+\infty} \frac{n(t) e^{-\sigma t^\alpha}}{t^\alpha} dt < +\infty.$$

Proof. We integrate the integral by parts. Using the equality of Jensen for subharmonic functions (see [1]), it is enough to estimate the integral:

$$I = \int_1^{+\infty} \left(\int_1^t \frac{n(r) dr}{r} \right) e^{-\sigma t^\alpha} dt.$$

We integrate I by parts:

$$I = -\frac{1}{\alpha \sigma} \left(\frac{e^{-\sigma t^\alpha}}{t^{\alpha-1}} \int_1^t \frac{n(r) dr}{r} \right) \Big|_1^{+\infty} + \int_1^{+\infty} e^{-\sigma t^\alpha} \left(\frac{1-\alpha}{t^\alpha} \left(\int_1^t \frac{n(r) dr}{r} \right) + \frac{n(t)}{t^\alpha} \right) dt$$

According to Lemma 1, we have:

$$I = \int_1^{+\infty} e^{-\sigma t^\alpha} \left(\frac{1-\alpha}{t^\alpha} \int_1^t \frac{n(r) dr}{r} + \frac{n(t)}{t^\alpha} \right) dt = \frac{1}{\alpha \sigma} (1-\alpha) \int_1^{+\infty} \frac{e^{-\sigma t^\alpha}}{t^{\alpha-1}} \left(\int_1^t \frac{n(r) dr}{r} + n(t) \right) dt$$

By the hypothesis of the theorem $I \leq C$.

It is clear that in $0 \leq \alpha < 1$ the theorem is proved, since from the condition (5) implies that

$$\int_1^{+\infty} \frac{e^{-\sigma t^\alpha}}{t^\alpha} n(t) dt < +\infty.$$

Suppose $\alpha > 1$. Then by Lemma 1:

$$\int_1^{+\infty} \frac{e^{-\sigma t^\alpha}}{t^\alpha} \int_1^t \frac{n(r) dr}{r} dt \leq C_1 \int_1^{+\infty} \frac{e^{-\sigma t^\alpha}}{t^\alpha} \frac{dt}{e^{-\sigma t^\alpha} t^{\alpha-1}} = C_1 \int_1^{+\infty} \frac{dt}{t^{2\alpha-1}} < +\infty.$$

Because $\alpha > 1$, then $\int_1^{+\infty} \frac{e^{-\sigma t^\alpha}}{t^\alpha} n(t) dt < +\infty$.

The theorem is proved.

The proof of the main result

The proof of the direct assertion of theorem 1 follows from theorem 2.

The validity of the converse follows from Lemma 3.

That proves theorem 1 completely.

From Theorem 1 directly follows

Theorem 3. Let $\alpha > 0$, $SH_{\alpha, \infty} = \bigcup_{\sigma > 0} SH_{\alpha, \sigma}$. Then class $SH_{\alpha, \infty}$ coincides with the class of subharmonic functions in C , representable in the form $u(z) = \int_C \ln |A_p(z, \zeta)| d\mu(\zeta) + h(z)$, where μ is non-

negative measure in C , such that $n(t) = \mu(D_t)$, $D_t = \{z: |z| < t\}$, and also satisfies the condition

$\int_1^{+\infty} \frac{n(t)e^{-\sigma t^\alpha}}{t^\alpha} dt < +\infty$ for some $\alpha \geq 0$, h an arbitrary harmonic function in C , for which there exists

$\sigma > 0$: $\int_1^{+\infty} e^{-\sigma r^\alpha} \int_{-\pi}^{\pi} |h(re^{i\varphi})| d\varphi dr < +\infty$.

References

1. Hayman W.K. *Subharmonic functions*. Acad. Press, London etc., 1989, Vol. 2, 591 p.
2. Ronkin L.I. *Vvedenie v teoriyu tselykh funktsii mnogikh peremennykh* (Introduction to the theory of entire functions of several variables). Moscow, Nauka Publ., 1971, 432 p. (in Russ.).
3. Azarin V.S. *Teoriya rosta subgarmonicheskikh funktsii* (The theory of growth of subharmonic functions). Kharkov, KhGU Publ., 1982, 73 p. (in Russ.).
4. Ohlupina O.V. *Potentsialy tipa Grina i integralnye predstavleniya vesovykh klassov subgarmonicheskikh funktsii: dissertatsiya kandidata fiziko-matematicheskikh nauk* (Potentials of Green's type and integral representations of the weight classes of subharmonic functions: dissertation of the candidate of physical and mathematical sciences), Briansk, 2012, 118 p. (in Russ.).
5. Brelo M. *Osnovy klassicheskoi teorii potentsiala* (Fundamentals of classical potential theory), Moscow, Mir Publ., 1964, 215 p. (in Russ.). [Brelot M. *Elements de la th orie classique du potentiel*, Paris, 1961, 191 p. (in Fr.)]
6. Bykov S.V., Shamoian F.A. *O nuliakh tselykh funktsii s mazhorantoi beskonechnogo poriadka* (On the zeros of entire functions with majorant of infinite order). *Algebra i analiz*. Spb, Nauka Publ., 2009, Vol. 21, no. 6, pp. 66–79. (in Russ.).
7. Shamoian F.A., Djrbashian A.E. Topics in the theory of A_α^p spaces. *Teubner Texte zur Mathematik [Teubner Texts in Mathematics]*, BSB B.G. Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1988, Vol. 105, p. 200.
8. Shamoian F.A., Shubabko E.N. *Vvedenie v teoriyu vesovykh L^p -klassov meromorfnykh funktsii* [Introduction to the theory of the weight L^p -classes of meromorphic functions]. Brjansk, RIO BGU Publ., 2009, 153 p. (in Russ.).

Received November 3, 2017

УДК 517.53, 517.54

DOI: 10.14529/mmph180101

**ОПИСАНИЕ НЕКОТОРЫХ ВЕСОВЫХ ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫХ КЛАССОВ
СУБГАРМОНИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ****О.В. Охлупина**Брянский государственный инженерно-технологический университет, г. Брянск, Российская
Федерация

E-mail: helga131081@yandex.ru

Роль субгармонических функций в таких разделах анализа, как комплексный и вещественный анализ, весьма существенна. Такие классы функций тесно связаны с аналитическими гармоническими функциями и вносят важный вклад в общую теорию потенциала и математическую физику. В трудах Р. Неванлинны, У. Хеймана получены параметрические представления классов субгармонических в плоскости функций, характеристика которых имеет степенной рост в бесконечности. Вопрос о том, верны ли аналогичные представления для весовых классов, которые допускают более сильный рост в бесконечности (например, экспоненциальный рост), возникает в теории целых и мероморфных функций. В статье введены в рассмотрение классы субгармонических функций с характеристикой Неванлинны, которая суммируема с экспоненциальным весом на комплексной плоскости, а также изучены представляющие меры функций таких классов. При доказательстве результатов применяются методы комплексного и функционального анализа. Существенную роль в исследовании играют потенциалы, построенные на основе факторов модифицированного произведения Вейерштрасса. Доказательство основного результата базируется на использовании вспомогательных утверждений, сформулированных в виде лемм.

Ключевые слова: субгармоническая функция; гармоническая функция; представляющие меры; характеристика Неванлинны.

Литература

1. Hayman, W.K. Subharmonic functions / W.K. Hayman. – Acad. Press, London etc. – 1989. – Vol. 2. – 591 p.
2. Ронкин, Л.И. Введение в теорию целых функций многих переменных / Л.И. Ронкин. – М.: Наука, 1971. – 432 с.
3. Азарин, В.С. Теория роста субгармонических функций / В.С. Азарин. – Харьков: ХГУ, 1982. – 73 с.
4. Охлупина, О.В. Потенциалы типа Грина и интегральные представления весовых классов субгармонических функций: дис. ... канд. физ.-мат. наук / О.В. Охлупина. – Брянск, 2012. – 118 с.
5. Брело, М. Основы классической теории потенциала / М. Брело. – М.: Мир, 1964. – 215 с.
6. Быков, С.В. О нулях целых функций с мажорантой бесконечного порядка / С.В. Быков, Ф.А. Шамоян // Алгебра и анализ. – Санкт-Петербургское отделение Института математики РАН им. В.А. Стеклова, СПб: Наука, 2009. – Т. 21, № 6. – С. 66–79.
7. Shamoian, F.A. Topics in the theory of A_α^p spaces / F.A. Shamoian, A.E. Djrbashian // Teubner Texte zur Mathematik [Teubner Texts in Mathematics]. – BSB V. G. Teubner Verlagsgesellschaft, Leipzig, 1988. – Vol. 105. – P. 200.
8. Шамоян, Ф.А. Введение в теорию весовых L^p -классов мероморфных функций / Ф.А. Шамоян, Е.Н. Шубабко. – Брянск: РИО БГУ, 2009. – 153 с.

Поступила в редакцию 3 ноября 2017 г.

ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ КОЭФФИЦИЕНТНОЙ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ДЛЯ ЭЛЛИПТИЧЕСКОГО УРАВНЕНИЯ

Р.К. Тагиев, Р.С. Касимова

Бакинский государственный университет, г. Баку, Азербайджан

E-mail: r.tagiyev@list.ru, rena.kasimova@list.ru

Одним из основных типов обратных задач для уравнений с частными производными являются задачи, в которых подлежат определению коэффициенты уравнений или величин, входящих в них, по некоторой дополнительной информации. Такие задачи называют коэффициентными обратными задачами для уравнений с частными производными. Обратные задачи для уравнений с частными производными могут быть поставлены в вариационной форме, т. е. как задачи оптимального управления соответствующими системами. Рассматривается вариационная постановка одной коэффициентной обратной задачи для двумерного эллиптического уравнения с дополнительным интегральным условием. При этом управляющая функция входит в коэффициент при решении уравнения состояния и является элементом пространства квадратично суммируемых по Лебегу функций. Целевой функционал составлен на основе дополнительного интегрального условия. Граничные условия для уравнения состояния являются смешанными, т. е. в одной части границы задано второе краевое условие, а в другой части первое краевое условие. Под решением краевой задачи при каждом фиксированном управляющем коэффициенте понимается обобщенное решение из пространства Соболева. Исследованы вопросы корректности рассматриваемой коэффициентной обратной задачи в вариационной постановке. Доказано, что рассматриваемая задача корректно поставлена в слабой топологии пространства управляющих функций, т. е. множество оптимальных управлений не пусто, слабо компактно и любая минимизирующая последовательность задачи слабо сходится к множеству оптимальных управлений. Кроме того, доказана дифференцируемость по Фреше целевого функционала и найдена формула для его градиента. Установлено необходимое условие оптимальности в виде вариационного неравенства.

Ключевые слова: эллиптическое уравнение; обратная задача; интегральное условие; вариационный метод.

Введение

Одной из постановок обратной задачи для уравнений математической физики является вариационная постановка, т. е. обратные задачи типа управления системами. В вариационной постановке обратных задач управляющие функции входят в коэффициенты уравнений состояния или граничные условия для них и целевые функционалы составляются на основе дополнительных условий [1].

В работах [2–8] и др. изучены вариационные постановки коэффициентных обратных задач. Однако такие постановки коэффициентных обратных задач с интегральными условиями мало изучены [9].

В статье изучается вариационная постановка обратной задачи для эллиптического уравнения с дополнительным интегральным условием. Исследованы вопросы корректности рассматриваемой задачи, выведена формула для градиента целевого функционала и установлено необходимое условие оптимальности.

1. Постановка задачи

Пусть $\Omega = \{x = (x_1, x_2) : 0 < x_i < 1, i = 1, 2\}$ – квадрат в R^2 с границей Γ , $\Gamma_{-1} = \{x = (x_1, x_2) : x_1 = 0, 0 < x_2 < 1\}$ – левая вертикальная сторона квадрата Ω . Пусть требуется минимизировать функционал

$$J(v) = \int_0^1 \left| u(0, x_2; v) - \int_0^1 H(x_1, x_2) u(x_1, x_2; v) dx_1 \right|^2 dx_2 \quad (1)$$

на решениях $u(x) = u(x_1, x_2) = u(x_1, x_2; v)$ краевой задачи

$$-\sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_i(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} \right) + v(x_2) u = f(x), \quad x \in \Omega, \quad (2)$$

$$-k_1(x) \frac{\partial u}{\partial x_1} = g(x), \quad x \in \Gamma_{-1}, \quad (3)$$

$$u(x) = 0, \quad x \in \Gamma \setminus \Gamma_{-1}, \quad (4)$$

соответствующих всем допустимым управлениям $v = v(x_2)$ из множества

$$V = \{v = v(x_2) \in L_2(0,1) : 0 < q_0 \leq v(x_2) \leq q_1 \text{ п.в. на } (0,1)\}. \quad (5)$$

Здесь q_0, q_1 – заданные числа, $H(x) \equiv H(x_1, x_2)$, $k_i(x), i=1,2$, $f(x)$, $g(x)$ – заданные функции, удовлетворяющие условиям

$$H(x), k_i(x) \in L_\infty(\Omega), i=1,2, f(x) \in L_2(\Omega), g(x) \equiv g(x_2) \in L_2(0,1);$$

$$0 < \nu \leq k_i(x) \leq \mu, i=1,2, |H(x)| \leq d \text{ п.в. на } \Omega,$$

где $\mu \geq \nu > 0, d > 0$ – заданные числа.

Назовем обобщенным решением из $W_{2,0}^1(\Omega)$ задачи (2)–(4), соответствующим управлению $v \in V$, функцию $u = u(x) = u(x; v)$ из $W_{2,0}^1(\Omega)$, удовлетворяющую интегральному тождеству

$$\int_{\Omega} \left[\sum_{i=1}^2 k_i(x) \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial \eta}{\partial x_i} + v(x_2) u \eta \right] dx = \int_{\Omega} f(x) \eta dx + \int_0^1 g(x_2) \eta(0, x_2) dx_2 \quad (6)$$

для всех $\forall \eta = \eta(x) \in W_{2,0}^1(\Omega)$.

При сделанных предположениях краевая задача (2)–(4) однозначно разрешима при каждом заданном $v \in V$ и справедлива априорная оценка [10, с. 200]

$$\|u\|_{2,\Omega}^{(1)} \leq M \left[\|f\|_{2,\Omega} + \|g\|_{2,\Gamma_{-1}} \right]. \quad (7)$$

Отсюда и из ограниченности вложений $W_2^1(\Omega) \rightarrow L_{r_1}(\Omega)$, $W_2^1(\Omega) \rightarrow L_{r_2}(\Gamma)$ [11, с. 78] следует, что верна оценка

$$\|u\|_{r_1,\Omega} + \|u\|_{r_2,\Gamma_{-1}} \leq M \left[\|f\|_{2,\Omega} + \|g\|_{2,\Gamma_{-1}} \right], \quad (8)$$

где $r_1, r_2 \in [2, \infty)$ – произвольные числа. Здесь и ниже через M обозначаем положительные постоянные.

Задача (1)–(5) тесно связана с коэффициентной обратной задачей, заключающейся в определении функций $\{u(x; v), v(x_2)\}$, удовлетворяющих условиям (2)–(5) и дополнительному интегральному условию

$$u(0, x_2; v) = \int_0^1 H(x_1, x_2) u(x_1, x_2; v) dx_1, \quad 0 < x_2 < 1. \quad (9)$$

Целевой функционал (1) составлен на основе условия (9). Если в задаче (1)–(5) окажется, что существует управление $v_* = v_*(x_2) \in V$, доставляющее функционалу (1) нулевое значение, то пара $\{u(x; v_*), v_*(x_2)\}$ будет решением обратной задачи (2)–(5), (9).

2. Корректность постановки задачи

Теорема 1. В задаче (1)–(5) существует хотя бы одно оптимальное управление, т. е. множество $V_* = \{v_* \in V : J(v_*) = J_*\}$ непусто. Кроме того, множество V_* слабо компактно в $L_2(0,1)$ и любая минимизирующая последовательность слабо сходится в $L_2(0,1)$ к множеству V_* .

Доказательство. Пусть $v \in V$ – некоторый элемент и $\{v_n\} \subset V$ – произвольная последовательность, такая, что

$$v_n(x_2) \rightarrow v(x_2) \text{ слабо в } L_2(0,1), \quad (10)$$

и $u_n = u(x; v_n)$ решение задачи (2)–(4) из $W_{2,0}^1(\Omega)$ при $v = v_n$. Тогда в силу (7) и (8) справедливы оценки

$$\|u_n\|_{2,\Omega}^{(1)} + \|u_n\|_{r_1,\Omega} + \|u_n\|_{r_2,\Gamma_{-1}} \leq M (n=1,2,\dots). \quad (11)$$

Кроме того, из (11) и компактности вложений $W_2^1(\Omega) \rightarrow L_{r_1}(\Omega)$, $W_2^1(\Omega) \rightarrow L_{r_2}(\Gamma)$ при любых $r_1, r_2 \geq 2$ [11, с. 78] следует, что существует подпоследовательность $\{u_{n_m}\}$, такая, что

$$u_{n_m}(x) \rightarrow u(x) \text{ слабо в } W_{2,0}^1(\Omega), \text{ сильно в } L_{r_1}(\Omega) \text{ и в } L_{r_2}(\Gamma_{-1}), \quad (12)$$

где $u = u(x) \in W_{2,0}^1(\Omega)$ – некоторый элемент.

Из (6) следует, что

$$\int_{\Omega} \left[\sum_{i=1}^2 k_i(x) \frac{\partial u_{n_m}}{\partial x_i} \frac{\partial \eta}{\partial x_i} + v_{n_m}(x_2) u_{n_m} \eta \right] dx = \int_{\Omega} f(x) \eta dx + \int_0^1 g(x_2) \eta(0, x_2) dx_2 \quad (m=1,2,\dots),$$

$$\forall \eta = \eta(x) \in W_{2,0}^1(\Omega). \quad (13)$$

Используя ограничение $0 < q_0 \leq v(x_2) \leq q_1$ п.в. на $L_2(0,1)$, неравенство Коши–Буняковского и соотношения (10), (12), получаем

$$\left| \int_{\Omega} v_{n_m}(x_2) u_{n_m} \eta dx - \int_{\Omega} v(x_2) u \eta dx \right| \leq \left| \int_{\Omega} v_{n_m}(x_2) (u_{n_m} - u) \eta dx \right| + \left| \int_{\Omega} [v_{n_m}(x_2) - v(x_2)] u \eta dx \right| \leq$$

$$\leq q_1 \|u_{n_m} - u\|_{2,\Omega} \cdot \|\eta\|_{2,\Omega} + \left| \int_{\Omega} [v_{n_m}(x_2) - v(x_2)] u \eta dx \right| \rightarrow 0 \text{ при } m \rightarrow \infty. \quad (14)$$

Из (12)–(14) следует, что $u = u(x)$ удовлетворяет тождеству (6), т. е. $u(x) = u(x; v)$, $x \in \Omega$.

Используя единственность решения $u = u(x; v)$ задачи (2)–(4), можно показать, что соотношение (12) справедливо и для всей последовательности $\{u_n\}$, т. е.

$$u_n(x) = u(x; v_n) \rightarrow u(x) = u(x; v) \text{ слабо в } W_{2,0}^1(\Omega), \text{ сильно в } L_{r_1}(\Omega) \text{ и в } L_{r_2}(\Gamma_{-1}). \quad (15)$$

Покажем, что $J(v_n) \rightarrow J(v)$ при $n \rightarrow \infty$. Используя равенство (1), очевидное неравенство $(a+b)^2 \leq 2(a^2 + b^2)$, неравенство Коши–Буняковского и условие $|H(x)| \leq d$ п.в. на Ω , нетрудно убедиться, что справедливы следующие цепочки неравенств:

$$|J(v_n) - J(v)| \leq \left\{ \int_0^1 \left[|u(0, x_2; v_n) - u(0, x_2; v)| + \int_0^1 |H(x_1, x_2)| \cdot |u(x_1, x_2; v_n) - u(x_1, x_2; v)| dx_1 \right]^2 dx_2 \right\}^{1/2} \times$$

$$\times \left\{ \int_0^1 \left[|u(0, x_2; v_n)| + |u(0, x_2; v)| + \int_0^1 |H(x_1, x_2)| \cdot |u(x_1, x_2; v_n)| dx_1 + \right. \right.$$

$$\left. + \int_0^1 |H(x_1, x_2)| \cdot |u(x_1, x_2; v)| dx_1 \right]^2 dx_2 \right\}^{1/2} \leq 2\sqrt{2} \left\{ \int_0^1 \left[|u(0, x_2; v_n) - u(0, x_2; v)|^2 + \right. \right.$$

$$\left. + \int_0^1 H^2(x_1, x_2) dx_1 \cdot \int_0^1 |u(x_1, x_2; v_n) - u(x_1, x_2; v)|^2 dx_1 \right] dx_2 \right\}^{1/2} \times$$

$$\begin{aligned} & \times \left\{ \int_0^1 \left[|u(0, x_2; v_n)|^2 + |u(0, x_2; v)|^2 + \int_0^1 H^2(x_1, x_2) dx_1 \cdot \int_0^1 u^2(x_1, x_2; v_n) dx_1 + \right. \right. \\ & \left. \left. + \int_0^1 H^2(x_1, x_2) dx_1 \cdot \int_0^1 u^2(x_1, x_2; v) dx_1 \right] dx_2 \right\}^{1/2} \leq 2\sqrt{2} \left[\|u_n - u\|_{2, \Gamma_{-1}} + d \|u_n - u\|_{2, \Omega} \right] \times \\ & \quad \times \left[\|u_n\|_{2, \Gamma_{-1}} + \|u\|_{2, \Gamma_{-1}} + d \left(\|u_n\|_{2, \Omega} + \|u\|_{2, \Omega} \right) \right]. \end{aligned} \quad (16)$$

Используя оценки (7), (8), (11) и соотношения (15) из (16) получаем, что $J(v_n) \rightarrow J(v)$ при $n \rightarrow \infty$, т. е. функционал $J(v)$ слабо в $L_2(0,1)$ непрерывен на слабо компактном множестве V . Тогда из [12, с. 49] следует, что справедливы утверждения теоремы 1. Теорема 1 доказана.

3. Дифференцируемость целевого функционала и условие оптимальности

Для задачи (1)–(5) введем сопряженную краевую задачу:

$$-\sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_i(x) \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \right) + v(x_2) \psi = -2H(x_1, x_2) \left[u(0, x_2; v) - \int_0^1 H(\xi_1, x_2) u(\xi_1, x_2; v) d\xi_1 \right], \quad x \in \Omega, \quad (17)$$

$$-k_1(x) \frac{\partial \psi}{\partial x_1} = 2 \left[u(0, x_2; v) - \int_0^1 H(\xi_1, x_2) u(\xi_1, x_2; v) d\xi_1 \right], \quad x \in \Gamma_{-1}, \quad (18)$$

$$\psi(x; v) = 0, \quad x \in \Gamma \Gamma_{-1}. \quad (19)$$

Назовем обобщенным решением из $W_{2,0}^1(\Omega)$ задачи (17)–(19), соответствующим управлению $v(x_2) \in L_2(0,1)$, функцию $\psi = \psi(x) = \psi(x; v)$ из $W_{2,0}^1(\Omega)$, удовлетворяющую интегральному тождеству

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} \left[\sum_{i=1}^2 k_i(x) \frac{\partial \psi}{\partial x_i} \frac{\partial \eta}{\partial x_i} + v(x_2) \psi \eta \right] dx = -2 \int_{\Omega} H(x_1, x_2) \left[u(0, x_2; v) - \int_0^1 H(x_1, x_2) u(x_1, x_2; v) dx_1 \right] \eta dx + \\ & \quad + 2 \int_0^1 \left[u(0, x_2; v) - \int_0^1 H(x_1, x_2) u(x_1, x_2; v) dx_1 \right] \eta(0, x_2) dx_2 \end{aligned} \quad (20)$$

при любой $\eta = \eta(x) \in W_{2,0}^1(\Omega)$.

Используя очевидное неравенство $(a+b)^2 \leq 2(a^2+b^2)$, неравенство Коши–Буняковского и условие $|H(x)| \leq d$ п.в. на Ω , имеем:

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} H^2(x_1, x_2) \left[u(0, x_2; v) - \int_0^1 H(\xi_1, x_2) u(\xi_1, x_2; v) d\xi_1 \right]^2 dx \leq \\ & \leq 2 \int_{\Omega} H^2(x_1, x_2) \left[\int_0^1 u^2(0, x_2; v) + \int_0^1 H^2(\xi_1, x_2) dx_1 \cdot \int_0^1 u^2(\xi_1, x_2; v) d\xi_1 \right] dx \leq 2d^2 \left[\|u\|_{2, \Gamma_{-1}}^2 + d^2 \|u\|_{2, \Omega}^2 \right], \\ & \quad \int_0^1 \left[u(0, x_2; v) - \int_0^1 H(x_1, x_2) u(x_1, x_2; v) dx_1 \right]^2 dx_2 \leq \\ & \leq 2 \int_0^1 \left[u^2(0, x_2; v) + \int_0^1 H^2(x_1, x_2) dx_1 \cdot \int_0^1 u^2(x_1, x_2; v) dx_1 \right] dx_2 \leq \left[\|u\|_{2, \Gamma_{-1}}^2 + d^2 \|u\|_{2, \Omega}^2 \right]. \end{aligned}$$

Отсюда и из оценок (7), (8) следует, что правые части уравнения (17) и граничного условия (18) являются элементами пространств $L_2(\Omega)$ и $L_2(\Gamma_{-1})$ соответственно. Тогда для каждого за-

данного $v \in V$ задача (17)–(19) имеет единственное обобщенное решение из $W_{2,0}^1(\Omega)$ и справедлива оценка [10, с. 200]

$$\|\psi\|_{2,\Omega}^{(1)} \leq M \left[\|u\|_{2,\Omega} + \|u\|_{2,\Gamma_{-1}} \right].$$

Учитывая здесь оценки (7), (8), получаем

$$\|\psi\|_{2,\Omega}^{(1)} \leq M \left[\|f\|_{2,\Omega} + \|g\|_{2,\Gamma_{-1}} \right]. \quad (21)$$

Отсюда и из ограниченности вложений $W_2^1(\Omega) \rightarrow L_{r_1}(\Omega)$, $W_2^1(\Omega) \rightarrow L_{r_2}(\Gamma)$ при произвольных $r_1, r_2 \in [2, \infty)$ получаем оценку

$$\|\psi\|_{r_1,\Omega} + \|\psi\|_{r_2,\Gamma_{-1}} \leq M \left[\|f\|_{2,\Omega} + \|g\|_{2,\Gamma_{-1}} \right]. \quad (22)$$

Теорема 2. Функционал $J(v)$ непрерывно дифференцируем по Фреше на V и для его градиента справедливо равенство

$$J'(v) = \int_0^1 u(x_1, x_2; v) \psi(x_1, x_2; v) dx_1, \quad x_2 \in (0, 1). \quad (23)$$

Доказательство. Пусть $v, v + \Delta v \in V$ – произвольные управления, $\Delta v \in L_2(0, 1)$ и $\Delta u = \Delta u(x) = u(x; v + \Delta v) - u(x; v)$, $x \in \Omega$. Из условий (2)–(4) следует, что Δu является обобщенным решением из $W_{2,0}^1(\Omega)$ краевой задачи:

$$-\sum_{i=1}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \left(k_i(x) \frac{\partial \Delta u}{\partial x_i} \right) + (v + \Delta v) \Delta u = -\Delta v u, \quad x \in \Omega, \quad (24)$$

$$-k_1(x) \frac{\partial \Delta u}{\partial x_1} = 0, \quad x \in \Gamma_{-1}, \quad (25)$$

$$\Delta u(x) = 0, \quad x \in \Gamma \setminus \Gamma_{-1}. \quad (26)$$

Можно показать [10, с. 200], что при сделанных предположениях для функции Δu справедлива оценка

$$\|\Delta u\|_{2,\Omega}^{(1)} \leq M \|\Delta v u\|_{6/5,\Omega}. \quad (27)$$

Используя неравенство (1.7) из [11, с. 75], ограниченность вложения $W_2^1(\Omega) \rightarrow L_3(\Omega)$ [11, с. 78] и оценки (7), получаем

$$\|\Delta v u\|_{6/5,\Omega} \leq \|\Delta v\|_{2,(0,1)} \cdot \|u\|_{3,\Omega} \leq M \|u\|_{2,\Omega}^{(1)} \cdot \|\Delta v\|_{2,(0,1)} \leq M \|\Delta v\|_{2,(0,1)}.$$

Учитывая это неравенство в (27), имеем

$$\|\Delta u\|_{2,\Omega}^{(1)} \leq M \|\Delta v\|_{2,(0,1)}. \quad (28)$$

Кроме того, из ограниченности вложений $W_2^1(\Omega) \rightarrow L_{r_1}(\Omega)$, $W_2^1(\Omega) \rightarrow L_{r_2}(\Gamma)$ при произвольных $r_1, r_2 \in [2, \infty)$ и из (28) следует, что верна оценка

$$\|\Delta u\|_{r_1,\Omega} + \|\Delta u\|_{r_2,\Gamma_{-1}} \leq M \|\Delta v\|_{2,(0,1)}. \quad (29)$$

Приращение функционала (1) имеет вид

$$\begin{aligned} \Delta J(v) = J(v + \Delta v) - J(v) = & 2 \int_0^1 \left\{ \left[u(0, x_2; v) - \int_0^1 H(x_1, x_2) u(x_1, x_2; v) dx_1 \right] \cdot \left[\Delta u(0, x_2) - \right. \right. \\ & \left. \left. - \int_0^1 H(x_1, x_2) \Delta u(x_1, x_2) dx_1 \right] \right\} dx_2 + \int_0^1 \left| \Delta u(0, x_2) - \int_0^1 H(x_1, x_2) \Delta u(x_1, x_2) dx_1 \right|^2 dx_2. \quad (30) \end{aligned}$$

С помощью решений краевых задач (17)–(19) и (24)–(26) преобразуем правую часть равенства (30). Для решения краевой задачи (24)–(26) справедливо равенство

$$\int_{\Omega} \left\{ \sum_{i=1}^2 k_i(x) \frac{\partial \Delta u}{\partial x_i} \frac{\partial \psi}{\partial x_i} + (v + \Delta v) \Delta u \psi \right\} dx = - \int_{\Omega} \Delta v u \psi dx. \quad (31)$$

Полагая в тождестве (20) $\eta = \Delta u$ и вычитая полученное равенство из (31), имеем

$$2 \int_0^1 \left\{ \left[u(0, x_2; v) - \int_0^1 H(x_1, x_2) u(x_1, x_2; v) dx_1 \right] \cdot \left[\Delta u(0, x_2) - \int_0^1 H(x_1, x_2) \Delta u(x_1, x_2) dx_1 \right] \right\} dx_2 = \\ = \int_{\Omega} (u \psi \Delta v + \Delta u \psi \Delta v) dx.$$

Учитывая это равенство в (30), имеем

$$\Delta J(v) = \int_{\Omega} u \psi \Delta v dx + R, \quad (32)$$

где

$$R = \int_0^1 \left| \Delta u(0, x_2; v) - \int_0^1 H(x_1, x_2) \Delta u(x_1, x_2; v) dx_1 \right|^2 dx_2 + \int_{\Omega} \Delta u \psi \Delta v dx. \quad (33)$$

Проведем оценку остаточного члена R . Используя равенство (33), неравенство $(a+b)^2 \leq 2(a^2 + b^2)$, неравенство Коши–Буняковского и оценки (29), имеем

$$R \leq 2 \int_0^1 \left[\Delta u^2(0, x_2) + \left(\int_0^1 H(x_1, x_2) \Delta u(x_1, x_2) dx_1 \right)^2 \right] dx_2 + \\ + \|\Delta u\|_{4, \Omega} \cdot \|\psi\|_{4, \Omega} \cdot \|\Delta v\|_{2, (0,1)} \leq 2 \left[\|\Delta u\|_{2, \Gamma_{-1}}^2 + d^2 \|\Delta u\|_{2, \Omega}^2 \right] + \\ + \|\Delta u\|_{2, \Omega}^{(1)} \cdot \|\psi\|_{2, \Omega}^{(1)} \|\Delta v\|_{2, (0,1)} \leq M \|\Delta v\|_{2, (0,1)}^2. \quad (34)$$

Учитывая в (32) эту оценку, заключаем, что функционал (1) дифференцируем по Фреше в $L_2(0,1)$ и справедлива формула (23).

Теперь покажем, что отображение $v \rightarrow J'(v)$, определяемое равенством (23), непрерывно действует из $L_2(0,1)$ в $L_2(0,1)$. Пусть

$$\Delta \psi = \Delta \psi(x) = \psi(x; v + \Delta v) - \psi(x; v), \quad \psi = \psi(x) = \psi(x; v), \quad x \in \Omega.$$

Рассуждая аналогично выводу оценок (22) и (29), выведем оценку

$$\|\Delta \psi\|_{r_1, \Omega} + \|\Delta \psi\|_{r_2, \Gamma_{-1}} \leq M \|\Delta v\|_{2, (0,1)}. \quad (35)$$

Кроме того, используя равенство (23), применяя неравенство Коши–Буняковского и учитывая оценки (29), (35), имеем

$$\|J'(v + \Delta v) - J'(v)\|_{2, (0,1)}^2 = \int_0^1 \left\{ \int_0^1 (u \Delta \psi + \Delta u \psi + \Delta u \Delta \psi) dx_1 \right\}^2 dx_2 \leq \\ 4 \int_0^1 \left[\left(\int_0^1 u \Delta \psi dx_1 \right)^2 + \left(\int_0^1 \Delta u \psi dx_1 \right)^2 + \left(\int_0^1 \Delta u \Delta \psi dx_1 \right)^2 \right] dx_2 \leq \\ 4 \int_0^1 \left[\int_0^1 u^2 dx_1 \int_0^1 \Delta \psi^2 dx_1 + \int_0^1 \Delta u^2 dx_1 \int_0^1 \psi^2 dx_1 + \int_0^1 \Delta u^2 dx_1 \int_0^1 \Delta \psi^2 dx_1 \right] dx_2 \leq \\ 4 \left(\|u\|_{4, \Omega}^2 \cdot \|\Delta \psi\|_{4, \Omega}^2 + \|\Delta u\|_{4, \Omega}^2 \cdot \|\psi\|_{4, \Omega}^2 + \|\Delta u\|_{4, \Omega}^2 \cdot \|\Delta \psi\|_{4, \Omega}^2 \right) \leq M \left(\|\Delta v\|_{2, (0,1)}^2 + \|\Delta v\|_{2, (0,1)}^4 \right).$$

Отсюда следует, что отображение $v \rightarrow J'(v)$ непрерывно действует из $L_2(0,1)$ в $L_2(0,1)$. Теорема 2 доказана.

Теорема 3. Пусть $v_* \in V$ – оптимальное управление в задаче (1)–(5). Тогда для любого $v \in V$ выполняется неравенство

$$\int_0^1 \left[\int_0^1 u(x_1, x_2; v_*) \psi(x_1, x_2; v_*) dx_1 \right] [v(x_2) - v_*(x_2)] dx_2 \geq 0. \quad (36)$$

Справедливость неравенства (36) следует из теоремы 5 работы [12, с. 28] с использованием формулы (23).

Литература

1. Тихонов, А.Н. О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации / А.Н. Тихонов // ДАН СССР. – 1963. – Т. 151, № 3. – С. 501–504.
2. Искендеров, А.Д. О вариационных постановках многомерных обратных задач математической физики / А.Д. Искендеров // ДАН СССР. – 1984. – Т. 274, № 3. – С. 531–533.
3. Алифанов, О.А. Экстремальные методы решения некорректных задач / О.А. Алифанов, Е.А. Артюхин, С.В. Румянцев. – М.: Наука, 1988. – 285 с.
4. Karchevsky, A.L. Properties the misfit functional for a nonlinear one – dimensional coefficient hyperbolic inverse problem / A.L. Karchevsky // Journal of Inverse and Ill-Posed Problems. – 1997. – Vol. 5, no. 2. – P. 139–165.
5. Кабанихин, С.И. Обоснование метода наискорейшего спуска в интегральной постановке обратной задачи гиперболического уравнения / С.И. Кабанихин, К.Т. Исаков // Сиб. матем. журн. – 2001. – Т. 42, № 3. – С. 567–584.
6. Тагиев, Р.К. Вариационный метод решения обратной задачи об определении коэффициентов эллиптических уравнений / Р.К. Тагиев // Международная конференция «Обратные задачи теоретической и математической физики», Азербайджан, Сумгаит, 5–6 мая 2003 г. – С. 29–31.
7. Искендеров, А.Д. Оптимальная идентификация коэффициентов эллиптических уравнений / А.Д. Искендеров, Р.А. Гамидов // Автоматика и телемеханика. – 2011. – № 12. – С. 144–155.
8. Iskenderov, A.D. Variational method solving the problem of identification of the coefficients of quasilinear parabolic problem / A.D. Iskenderov, R.K. Tagiyev // The 7th International Conference «Inverse Problems: modelling and Simulation» (IPMS – 2014), May 26–31. – 2014. – P. 31.
9. Тагиев, Р.К. Об оптимизационной постановке коэффициентной обратной задачи для параболического уравнения с дополнительным интегральным условием / Р.К. Тагиев, Р.А. Касумов // Вестник Томского государственного университета. Математика и механика. – 2017. – № 45. – С. 49–59.
10. Ладыженская, О.А. Линейные и квазилинейные уравнения эллиптического типа / О.А. Ладыженская, Н.Н. Уральцева. – М.: Наука, 1973. – 576 с.
11. Ладыженская, О.А. Линейные и квазилинейные уравнения параболического типа / О.А. Ладыженская, В.А. Солонников, Н.Н. Уральцева. – М.: Наука, 1967. – 736 с.
12. Васильев, Ф.П. Методы решения экстремальных задач / Ф.П. Васильев. – М.: Наука, 1981. – 400 с.

Поступила в редакцию 18 мая 2017 г.

VARIATIONAL METHOD OF SOLVING A COEFFICIENT INVERSE PROBLEM FOR AN ELLIPTIC EQUATION

R.K. Tagiev, R.S. Kasymova

Baku State University, Baku, Azerbaijan

E-mail: r.tagiyev@list.ru, rena.kasimova@list.ru

One of the main types of inverse problems for equations with partial derivatives are the problems in which coefficients of equations or included values have to be determined based on some additional information. Such problems are called coefficient inverse problems for equations with partial derivatives. Inverse problems for equations with partial derivatives can be set in a variational form, i. e. like problems of optimal control by corresponding systems. Variational setting of one coefficient inverse problem for a two-dimensional elliptic equation with additional integral condition is considered. At that, the control function gets included in the coefficient when solving the equation of state, and is an element of a space of quadric totalized functions in the sense of Lebeg. Objective functional is set on the basis of an additional integral condition. Boundary conditions for equation of the state are mixed, i.e. the second boundary condition is given in one part of the boundary, and the first boundary condition is given in another part. Solving the boundary problem at each fixed control coefficient intends a generalized solution from the Sobolev space. The questions of correctness of the considered coefficient inverse problem in variational setting are studied. It is proved that the considered problem is correctly set in the weak topology of control functions' space. I. e. the multitude of optimal controls is nonvacuous and weakly compact; and any minimizing sequence of the problem weakly converges to the multitude of optimal controls. Besides, differentiability of objective functional in the sense of Frechet is proved, and a formula for its gradient is obtained. The necessary optimum condition in the form of variational inequality is determined.

Keywords: elliptic equation; inverse problem; integral condition, variational method.

References

1. Tikhonov A.N. *DAN SSSR*, 1963, Vol. 151, no. 3, pp. 501–504. (in Russ.).
2. Iskenderov A.D. *DAN SSSR*, 1984, Vol. 274, no. 3, pp. 531–533. (in Russ.).
3. Alifanov O.A., Artiukhin E.A., Rumiantsev S.V. *Extreme methods for solving ill-posed problems* (Ekstremalnye metody resheniia nekorrektnykh zadach). Moscow, Nauka Publ., 1988, 285 p. (in Russ.).
4. Karchevsky, A.L. Properties of the misfit functional for a nonlinear one-dimensional coefficient hyperbolic inverse problem. *Journal of Inverse and Ill-Posed Problems*, 2009, Vol. 5, no. 2, pp. 139–164. DOI: 10.1515/jiip.1997.5.2.139
5. Kabanikhin S.I., Isakov K.T. Justification of the Steepest Descent Method for the Integral Statement of an Inverse Problem for a Hyperbolic Equation. *Siberian Mathematical Journal*, 2001, Vol. 42, no. 3, pp. 478–494. DOI: 10.1023/A:1010471125870
6. Tagiev R.K. Variatsionnyi metod resheniia obratnoi zadachi ob opredelenii koeffitsientov ellipticheskikh uravnenii (A Variational Method for Solving the Inverse Problem of Determining the Coefficients of Elliptic Equations). *Mezhdunarodnaia konferentsiia "Obratnye zadachi teoreticheskoi i matematicheskoi fiziki"* (International Conference "Inverse Problems of Theoretical and Mathematical Physics"), Azerbaijan. Sumgait, May 5–6, 2003, pp. 29–31. (in Russ.).
7. Iskenderov A.D., Gamidov R.A. Optimal identification of coefficients of elliptic equations. *Automation and Remote Control*, 2011, Vol. 72, no. 12, pp. 2553–2562. DOI: 10.1134/S0005117911120101
8. Iskenderov A.D., Tagiyev R.K. Variational method solving the problem of the quasilinear parabolic problem. *7th International Conference "Inverse Problems: modelling and Simulation" (IPMS – 2014)*, May 26–31, 2014, p. 31.

9. Tagiyev R.K., Kasumov R.A. On the optimization formulation of the coefficient inverse problem for a parabolic equation with an additional integral condition. *Bulletin of Tomsk State University. Mathematics and mechanics*, 2017, no. 45, pp. 49–59. DOI: 10.17223/19988621/45/4

10. Ladyzhenskaya O.A., Ural'tseva N.N. *Lineynye i kvazilineynye uravneniya ellipticheskogo tipa* (Linear and quasilinear equations of elliptic type). Moscow, Nauka Publ., 1973, 576 p. (in Russ.).

11. Ladyzhenskaya O.A., Solonnikov V.A., Ural'tseva N.N. *Lineynye i kvazilineynye uravneniya parabolicheskogo tipa* (Linear and quasilinear equations of parabolic type). Moscow, Nauka Publ., 1967, 736 p. (in Russ.).

12. Vasil'ev F.P. *Metody resheniya ekstremal'nykh zadach*. Moscow, Nauka Publ., 1981, 400 p. (in Russ.).

Received May 18, 2017

АСИМПТОТИКА РЕШЕНИЯ СИНГУЛЯРНО ВОЗМУЩЕННОЙ ЗАДАЧИ ДИРИХЛЕ СО СЛАБОЙ ОСОБОЙ ТОЧКОЙ

Д.А. Турсунов, К. Алымкулов, Б.А. Азимов

Ошский государственный университет, г. Ош, Кыргызская Республика

E-mail: tdaosh@gmail.com

Рассматривается задача Дирихле для сингулярно возмущенного, линейного, однородного обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка с негладким коэффициентом в действительной оси. Подобные задачи встречаются в физике, технике, механике сплошной среды, гидродинамике и др. Целью исследования является развитие асимптотического метода пограничных функций Вишика–Люстерника–Васильевой–Иманалиева для сингулярно возмущенных дифференциальных уравнений, в случае, когда соответствующее невозмущенное уравнение имеет негладкое решение в рассматриваемой области. По терминологии А.М. Ильина подобные задачи называют бисингулярными. В работе доказывается возможность применения обобщенного метода пограничных функций к построению полного, равномерного асимптотического разложения решения краевой задачи для сингулярно возмущенного, линейного обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка со слабой особой точкой или интегрируемой особой точкой. Построенное разложение решения является асимптотическим в смысле Эрдей. При построении равномерного асимптотического разложения решения задачи Дирихле использованы: метод малого параметра, метод математической индукции, классический метод пограничных функций, обобщенный метод пограничных функций и принцип максимума. С помощью принципа максимума получена оценка для остаточного члена асимптотического разложения, т. е. равномерное, полное асимптотическое разложение решения по малому параметру обосновано. Приведен конкретный пример.

Ключевые слова: асимптотическое решение; бисингулярная задача; задача Дирихле; малый параметр; пограничные функции.

Постановка задачи. Исследуем задачу Дирихле

$$\varepsilon y''(x) + x^\alpha y'(x) - y(x) = 0, \quad 0 < x < 1, \quad (1)$$

$$y(0) = a, \quad y(1) = b, \quad (2)$$

где $\varepsilon > 0$ – малый параметр, $a, b = \text{const}$, $\alpha = m/(m+1)$, m – фиксированное натуральное число.

Задача (1)–(2) при $\alpha = 1/2$ рассмотрена в монографии Коула [1, с. 32] и с помощью метода сращивания построено асимптотическое решение до первого порядка по малому параметру, но без обоснования. В работе [2] методом структурного сращивания исследована задача (1)–(2) при $\alpha = 1/m$, $m \in \mathbb{N}$, $y(0) = 0$ и оценка для остаточного члена получена неточно. В работе [3] обобщенным методом пограничных функций исследована задача (1)–(2) при $\alpha = 1/2$.

В данной работе мы обобщаем ранее рассмотренные случаи и предлагаем более оптимальный способ построения равномерного асимптотического разложения решения задачи (1)–(2) до любого порядка по малому параметру, чем в предыдущих работах.

Требуется построить полное асимптотическое разложение решения задачи (1)–(2) при $\varepsilon \rightarrow 0$.

Основной результат. Рассмотрим внешнее асимптотическое разложение решения задачи (1)–(2), которое ищем в виде

$$y(x) = y_0(x) + \varepsilon y_1(x) + \varepsilon^2 y_2(x) + \dots \quad (3)$$

После подстановки ряда (3) в уравнение (1) и приравнивания коэффициентов при одинаковых степенях малого параметра ε , учитывая граничное условие $y(1) = b$, получаем следующие задачи:

$$\begin{aligned} x^\alpha y_0'(x) - y_0(x) &= 0, & y_0(1) &= b, \\ x^\alpha y_k'(x) - y_k(x) &= -y_{k-1}''(x), & y_k(1) &= 0, \quad k = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Отсюда определяем неизвестные функций $y_k(x)$:

$$y_0(x) = be^{(x^\beta - 1)/\beta}, \text{ где } \beta = 1 - \alpha = \frac{1}{m+1}, \frac{1}{\beta} = m+1, y_k(x) = -e^{\frac{1}{\beta}x^\beta} \int_1^x e^{-\frac{1}{\beta}s^\beta} \frac{y_{k-1}''(s)}{s^\alpha} ds, k \in \mathbb{N}.$$

При $x \rightarrow 0$ имеем:

$$y_0(x) = be^{\frac{1}{\beta}(x^\beta - 1)} = O(1), y_0'(x) = O(x^{-\alpha}), y_0''(x) = O(x^{-1-\alpha}), x \rightarrow 0,$$

$$y_1(x) = -e^{\frac{1}{\beta}x^\beta} \int_1^x e^{-\frac{1}{\beta}s^\beta} \frac{y_0''(s)}{s^\alpha} ds = O(x^{-2\alpha}), x \rightarrow 0.$$

Методом математической индукции докажем, что

$$y_n(x) = O(x^{-(n-1)(\alpha+1)-2\alpha}), x \rightarrow 0, \forall n \in \mathbb{N}.$$

Действительно, при $n = 1$ верно: $y_1(x) = O(x^{-2\alpha}), x \rightarrow 0$.

Пусть при $n = k$ справедливо соотношение: $y_k(x) = O(x^{-(k-1)(\alpha+1)-2\alpha}), x \rightarrow 0$, тогда при $n = k + 1$ имеем

$$y_{k+1}(x) = -e^{\frac{1}{\beta}x^\beta} \int_1^x e^{-\frac{1}{\beta}s^\beta} s^{-\alpha} y_k''(s) ds = -e^{\frac{1}{\beta}x^\beta} \int_1^x \frac{\tilde{y}_k(s)}{s^\alpha s^{2\alpha+(k-1)(\alpha+1)+2}} ds = O(x^{-k(\alpha+1)-2\alpha}), x \rightarrow 0,$$

где $\tilde{y}_k \in C^\infty[0,1]$.

Следовательно, ряд (3) представим в виде

$$y(x) \sim y_0(x) + \frac{\varepsilon}{x^{2\alpha}} \left[y_1^{(0)}(x) + \left(\frac{\varepsilon}{x^{1+\alpha}} \right) y_2^{(0)}(x) + \dots + \left(\frac{\varepsilon}{x^{1+\alpha}} \right)^{n-1} y_n^{(0)}(x) + \dots \right], \quad x \rightarrow 0, \quad (4)$$

где $y_k^{(0)} \in C[0,1]$.

Очевидно, что ряд (3) или (4) является асимптотическим рядом на отрезке $\Omega(\varepsilon) = [\varepsilon^\gamma, 1]$, где $0 < \gamma < \frac{1}{1+\alpha} = \frac{m+1}{2m+1}$. Точку $x = 0$ называют слабой особой точкой уравнения (1).

Следовательно, задача (1)–(2) является бисингулярной [4].

В задаче (1)–(2) произведем замену, пусть

$$y(x) = be^{(m+1)(\sqrt[m+1]{x}-1)} z(x), \quad (5)$$

где $z(x)$ – новая неизвестная функция.

Тогда

$$y'(x) = be^{(m+1)(\sqrt[m+1]{x}-1)} \left(\frac{1}{x^\alpha} z(x) + z'(x) \right), \quad y''(x) = be^{(m+1)(\sqrt[m+1]{x}-1)} \left(-\frac{\alpha}{x^{1+\alpha}} z(x) + \frac{1}{x^{2\alpha}} z(x) + \frac{2}{x^\alpha} z'(x) + z''(x) \right),$$

$$y(0) = a = be^{-(m+1)} e^0 z(0) \Rightarrow z(0) = \frac{a}{b} e^{m+1}, \quad y(1) = b = be^{-(m+1)} e^{m+1} z(1) \Rightarrow z(1) = 1.$$

Подставляя (5) в задачу (1)–(2) с учетом этих соотношений, получаем:

$$\varepsilon \left(z''(x) + \frac{2}{x^\alpha} z'(x) - \frac{\alpha}{x^{1+\alpha}} z(x) + \frac{1}{x^{2\alpha}} z(x) \right) + x^\alpha z'(x) = 0, \quad (6)$$

$$z(0) = \frac{a}{b} e^{m+1}, \quad z(1) = 1. \quad (7)$$

Отметим, что бисингулярность не исчезает, т. е. задача (6)–(7) тоже является бисингулярной. Асимптотическое решение задачи будем искать в виде

$$z(x) = z_0(x) + \pi_0(t) + \mu(z_1(x) + \pi_1(t)) + \dots + \mu^k(z_k(x) + \pi_k(t)) + \dots, \quad (8)$$

где $t = x/\mu^{m+1}$, $\varepsilon = \mu^{2m+1}$.

Подставляя (8) в (6), имеем

$$\begin{aligned} & \varepsilon \sum_{k=0}^{\infty} \mu^k \left(z_k''(x) + \frac{2}{x^\alpha} z_k'(x) - \frac{\alpha}{x^{1+\alpha}} z_k(x) + \frac{1}{x^{2\alpha}} z_k(x) \right) + x^\alpha \sum_{k=0}^{\infty} \mu^k z_k'(x) + \\ & + \sum_{k=0}^{\infty} \mu^{k-1} \left(\pi_k''(t) + t^\alpha \pi_k'(t) + \frac{2\mu}{t^\alpha} \pi_k'(t) - \frac{\alpha\mu}{t^{1+\alpha}} \pi_k(t) + \frac{\mu^2}{t^{2\alpha}} \pi_k(t) \right) = 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Из граничных условий (2) имеем:

$$z_0(1) = 1, z_k(1) = 0, \pi_0(0) = \frac{a}{b} e^{m+1} - z_0(0), \pi_0(\tilde{\mu}) = 0, \pi_k(0) = -z_k(0), \pi_k(\tilde{\mu}) = 0, k \in N, \tilde{\mu} = 1/\mu^{m+1}. \quad (10)$$

Из равенства (9) и (10) для $z_0(x)$ получаем задачу:

$$x^\alpha z_0'(x) = 0, 0 < x < 1, z_0(1) = 1. \quad (11)$$

Задача (11) имеет единственное решение $z_0(x) = 1$.

Пусть $z_k(x) \equiv 0, k \in N$. Тогда равенство (9) представимо в виде

$$\sum_{k=0}^{\infty} \mu^{k-1} \left(\pi_k''(t) + t^\alpha \pi_k'(t) + \frac{2\mu}{t^\alpha} \pi_k'(t) - \frac{\alpha\mu}{t^{1+\alpha}} \pi_k(t) + \frac{\mu^2}{t^{2\alpha}} \pi_k(t) \right) - \frac{\alpha}{t^{1+\alpha}} + \frac{\mu}{t^{2\alpha}} = 0.$$

Отсюда для пограничных функций $\pi_k(t)$ имеем:

$$L\pi_0(t) \equiv \pi_0''(t) + t^\alpha \pi_0'(t) = 0, 0 < t < \tilde{\mu}, \pi_0(0) = \frac{a}{b} e^{m+1} - 1, \pi_0(\tilde{\mu}) = 0, \quad (12)$$

$$L\pi_1(t) = \frac{\alpha}{t^{1+\alpha}} + \frac{\alpha}{t^{1+\alpha}} \pi_0(t) - \frac{2}{t^\alpha} \pi_0'(t), 0 < t < \tilde{\mu}, \pi_1(0) = 0, \pi_1(\tilde{\mu}) = 0, \quad (13)$$

$$L\pi_2(t) = -\frac{1}{t^{2\alpha}} + \frac{\alpha}{t^{1+\alpha}} \pi_1(t) - \frac{2}{t^\alpha} \pi_1'(t) - \frac{1}{t^{2\alpha}} \pi_0(t), 0 < t < \tilde{\mu}, \pi_2(0) = 0, \pi_2(\tilde{\mu}) = 0, \quad (14)$$

$$L\pi_k(t) = \frac{\alpha}{t^{1+\alpha}} \pi_{k-1}(t) - \frac{2}{t^\alpha} \pi_{k-1}'(t) - \frac{1}{t^{2\alpha}} \pi_{k-2}(t), 0 < t < \tilde{\mu}, \pi_k(0) = 0, \pi_k(\tilde{\mu}) = 0, k = 3, 4, \dots \quad (15)$$

Решение задачи (12) имеет вид:

$$\pi_0''(t) + t^\alpha \pi_0'(t) = 0 \Rightarrow \left(\pi_0'(t) e^{\frac{1}{1+\alpha} t^{1+\alpha}} \right)' = 0 \Rightarrow \pi_0'(t) e^{\frac{1}{1+\alpha} t^{1+\alpha}} = c_1 \Rightarrow \pi_0(t) = c_2 - c_1 \int_t^{\tilde{\mu}} e^{-\frac{1}{1+\alpha} s^{1+\alpha}} ds.$$

Учитывая граничные условия $\pi_0(0) = \frac{a}{b} e^{m+1} - 1, \pi_0(\tilde{\mu}) = 0$, находим значения c_1 и c_2 :

$$\pi_0(\tilde{\mu}) = c_2 = 0 \Rightarrow c_2 = 0;$$

$$\pi_0(0) = -c_1 \int_0^{\tilde{\mu}} e^{-\frac{1}{1+\alpha} s^{1+\alpha}} ds = \frac{a}{b} e^{m+1} - 1 \Rightarrow c_1 = \left(1 - \frac{a}{b} e^{m+1} \right) A, A = \left(\int_0^{\tilde{\mu}} e^{-\frac{1}{1+\alpha} s^{1+\alpha}} ds \right)^{-1}.$$

Следовательно,

$$\pi_0(t) = \left(\frac{a}{b} e^{m+1} - 1 \right) A \int_t^{\tilde{\mu}} e^{-\frac{1}{1+\alpha} s^{1+\alpha}} ds.$$

Интегрируя по частям интеграл

$$\int_t^{\tilde{\mu}} e^{-\frac{1}{1+\alpha} s^{1+\alpha}} ds, t \rightarrow \tilde{\mu},$$

получим

$$\int_t^{\tilde{\mu}} e^{-\frac{1}{1+\alpha} s^{1+\alpha}} ds = \frac{1}{t^\alpha} e^{-\frac{1}{1+\alpha} t^{1+\alpha}} \left(1 - \frac{\alpha}{t^{1+\alpha}} + \frac{\alpha(1+2\alpha)}{t^{2(1+\alpha)}} + \dots + (-1)^n \frac{1}{t^{n(1+\alpha)}} \prod_{k=1}^n (k\alpha + k - 1) + \dots \right), t \rightarrow \tilde{\mu}.$$

Это означает, что функция $\pi_0(t)$ экспоненциально убывает при $t \rightarrow \tilde{\mu}, \mu \rightarrow 0$.

При решении уравнения $L\pi_0(t) = 0$ мы заметили, что оно имеет два линейно независимых решения: 1 и $\int_t^{\tilde{\mu}} e^{-\frac{1}{1+\alpha} s^{1+\alpha}} ds$. Не нарушая общности, линейно независимые решения уравнения

$$L\pi_0(t) = 0$$

можно представить в виде:

$$Y(t) = 1 - X(t), \quad X(t) = A \int_t^{\tilde{\mu}} e^{-\frac{1}{1+\alpha} s^{1+\alpha}} ds, \quad A \int_0^{\tilde{\mu}} e^{-\frac{1}{1+\alpha} s^{1+\alpha}} ds = 1.$$

Линейную независимость можно показать с помощью Якобиана:

$$J(X(t), Y(t)) = X(t)Y'(t) - X'(t)Y(t) = Ae^{-\frac{1}{1+\alpha} t^{1+\alpha}} \neq 0, \quad t \in [0, \tilde{\mu}].$$

Причиной такого выбора линейно независимых решений являются соотношения:

$$X(0) = 1, Y(0) = 0, X(\tilde{\mu}) = 0, Y(\tilde{\mu}) = 1,$$

которые понадобятся при построении функции Грина.

Так как $X(t) = 1 - At + o(t), t \rightarrow 0 \Rightarrow Y(t) = O(t), t \rightarrow 0$, то общее решение уравнения $Lz(t) = 0$ имеет вид $z(t) = c_1 Y(t) + c_2 X(t)$, $c_1, c_2 = \text{const}$. Отсюда вытекает лемма.

Лемма. Краевая задача $Lz(t) = 0, z(0) = z(\tilde{\mu}) = 0$ имеет только нулевое решение.

Справедлива

Теорема 1. Краевая задача

$$Lz(t) = f(t), \quad 0 < t < \tilde{\mu}, \quad z(0) = 0, \quad z(\tilde{\mu}) = 0$$

имеет единственное решение, и оно представимо в виде

$$z(t) = \int_0^{\tilde{\mu}} G(t, s) e^{\frac{1}{1+\alpha} s^{1+\alpha}} f(s) ds,$$

где $G(t, s) = \begin{cases} -Y(t)X(s), & 0 \leq t \leq s, \\ -Y(s)X(t), & s \leq t \leq \tilde{\mu}, \end{cases}$ – функция Грина, $f(t) \in C(0, \tilde{\mu})$,

$$f(t) = O(t^{-\gamma}), t \rightarrow 0, \gamma < 2; \quad f(t) = O(t^{-\tilde{\beta}}), t \rightarrow \tilde{\mu}, \quad \frac{1}{m+1} < \tilde{\beta}.$$

Доказательство. Решение $z(t)$ запишем в виде

$$z(t) = J_1(t) + J_2(t),$$

где $J_1(t) = -X(t) \int_0^t Y(s) e^{\frac{1}{1+\alpha} s^{1+\alpha}} f(s) ds$, $J_2(t) = Y(t) \int_t^{\tilde{\mu}} X(s) e^{\frac{1}{1+\alpha} s^{1+\alpha}} f(s) ds$.

Покажем, что функции $J_1(t)$ и $J_2(t)$ удовлетворяют граничным условиям. Так как $X(\tilde{\mu}) = 0$ и $Y(0) = 0$, поэтому достаточно доказать, что $J_1(t) \rightarrow 0, t \rightarrow 0$ и $J_2(t) \rightarrow 0, t \rightarrow \tilde{\mu}$.

1. Рассмотрим функцию $J_1(t)$. При $t \rightarrow 0$ имеем $|Y(t)| \leq ct, |f(t)| \leq ct^{-\gamma}$, поэтому

$$|J_1(t)| \leq c \int_0^t s^{1-\gamma} e^{\frac{1}{1+\alpha} s^{1+\alpha}} ds \leq ct^{2-\gamma} \rightarrow 0, \quad t \rightarrow 0.$$

2. Теперь рассмотрим $J_2(t)$ при $t \rightarrow \tilde{\mu}$:

$$|J_2(t)| \leq c \int_t^{\tilde{\mu}} s^{-\alpha-\tilde{\beta}} e^{\frac{1}{1+\alpha} s^{1+\alpha} - \frac{1}{1+\alpha} t^{1+\alpha}} ds = c \int_t^{\tilde{\mu}} s^{-\alpha-\tilde{\beta}} ds = O(t^{1-\alpha-\tilde{\beta}}) = O(t^{\frac{1}{m+1}-\tilde{\beta}}), \quad t \rightarrow \tilde{\mu}.$$

Поэтому решение $z(t)$ удовлетворяет граничным условиям. Подставляя функцию $z(t)$ в уравнение $Lz(t) = f(t)$ при $0 < t < \tilde{\mu}$, получаем тождество. Теорема 1 доказана.

С помощью этой теоремы доказывается существование и единственность решений уравнений (13)–(15). При $t \rightarrow \tilde{\mu}$ для функции $\pi_k(t)$ справедливы асимптотические разложения

$$\pi_{2k-1}(t) = O\left(\frac{1}{t^{2\alpha+(3\alpha-1)k}}\right), \quad \pi_{2k}(t) = O\left(\frac{1}{t^{(3\alpha-1)k}}\right), \quad k = 1, 2, \dots, t \rightarrow \tilde{\mu} = \mu^{-(m+1)}.$$

Кроме того, $\pi_k(t) = O\left(\sqrt[m+1]{t^k}\right), t \rightarrow 0, k = 0, 1, 2, \dots$

Таким образом мы доказали ограниченность функций $\pi_k(t)$ на отрезке $[0, \tilde{\mu}]$, когда $\mu \rightarrow 0$.

Теперь докажем, что ряд (8) является асимптотическим рядом на отрезке $x \in [0, 1]$. Для этого рассмотрим усеченный ряд

$$z(x) = 1 + \sum_{k=0}^{(2m+1)n} \mu^k \pi_k(t) + R_n(x, \varepsilon). \quad (16)$$

Подставляя (16) в задачу (1)–(2), и учитывая значения $\pi_k(t)$, имеем:

$$\varepsilon \left(R_n''(x, \varepsilon) + \frac{2}{x^\alpha} R_n'(x, \varepsilon) + \left(\frac{1}{x^{2\alpha}} - \frac{\alpha}{x^{1+\alpha}} \right) R_n(x, \varepsilon) \right) + x^\alpha R_n'(x, \varepsilon) = \varepsilon^n \Phi(t, \mu) \quad (17)$$

$$R_n(0, \varepsilon) = 0, R_n(1, \varepsilon) = 0, \quad (18)$$

где $\Phi(t, \mu) = \frac{\alpha}{t^{1+\alpha}} \pi_{(2m+1)n}(t) - \frac{2}{t^\alpha} \pi'_{(2m+1)n}(t) - \frac{1}{t^{2\alpha}} \pi_{(2m+1)n-1}(t) - \mu \frac{1}{t^{2\alpha}} \pi_{(2m+1)n}(t)$.

Из свойств функций $\pi_k(t)$ следует, что $\Phi(t, \mu) = O(1), \mu \rightarrow 0, t \in [0, \mu^{-(m+1)}]$.

Пусть

$$R_n(x, \varepsilon) = e^{-(m+1)\sqrt[m+1]{x}} r(x, \varepsilon),$$

тогда задача (17)–(18) примет вид:

$$\varepsilon r''(x, \varepsilon) + x^\alpha r'(x, \varepsilon) - r(x, \varepsilon) = e^{(m+1)\sqrt[m+1]{x}} \varepsilon^n \Phi(t, \mu), \quad 0 < x < 1, \quad r(0, \varepsilon) = 0, \quad r(1, \varepsilon) = 0.$$

Пусть $M = \max_{t \in [0, \tilde{\mu}]} \Phi(t, \mu), \mu \rightarrow 0$. Применяя теорему 26.4 [4], получаем:

$$|r(x, \varepsilon)| \leq \varepsilon^n M e^{(m+1)\sqrt[m+1]{x}} \Rightarrow |R_n(x, \varepsilon)| \leq \varepsilon^n M, \quad \varepsilon \rightarrow 0, \quad x \in [0, 1].$$

Справедлива

Теорема 2. Для решения задачи (1)–(2) справедливо асимптотическое разложение

$$y(x) = b e^{(m+1)\sqrt[m+1]{x-1}} \left(1 + \sum_{k=0}^{\infty} \mu^k \pi_k(t) \right), \quad \mu \rightarrow 0.$$

Пример. Пусть в задаче (1)–(2) $\alpha = 1/2$. Тогда асимптотическое решение представимо в виде

$$y(x) = b e^{2(\sqrt{x}-1)} \left(1 + \pi_0(t) + \mu \pi_1(t) + \dots + \mu^3 \pi_3(t) + R_1(x, \varepsilon) \right), \quad \mu \rightarrow 0,$$

где $t = x/\mu^2, \varepsilon = \mu^3$,

$$\begin{aligned} \pi_0(t) &= \left(\frac{a}{b} e^2 - 1 \right) A \int_t^{\tilde{\mu}} e^{-\frac{2}{3}s^{3/2}} ds, \quad A = \left(\int_0^{\tilde{\mu}} e^{-\frac{2}{3}s^{3/2}} ds \right)^{-1}, \\ \pi_1(t) &= \int_0^{\tilde{\mu}} G(t, s) e^{\frac{2}{3}s^{3/2}} \left(\frac{1}{2\sqrt{s^3}} + \frac{1}{2\sqrt{s^3}} \pi_0(s) - \frac{2}{\sqrt{s}} \pi_0'(s) \right) ds, \\ \pi_2(t) &= \int_0^{\tilde{\mu}} G(t, s) e^{\frac{2}{3}s^{3/2}} \left(-\frac{1}{s} + \frac{1}{2\sqrt{s^3}} \pi_1(s) - \frac{2}{\sqrt{s}} \pi_1'(s) - \frac{1}{s} \pi_0(s) \right) ds, \\ \pi_3(t) &= \int_0^{\tilde{\mu}} G(t, s) e^{\frac{2}{3}s^{3/2}} \left(\frac{1}{2\sqrt{s^3}} \pi_2(s) - \frac{2}{\sqrt{s}} \pi_2'(s) - \frac{1}{s} \pi_1(s) \right) ds, \\ G(t, s) &= \begin{cases} -Y(t)X(s), & 0 \leq t \leq s, \\ -Y(s)X(t), & s \leq t \leq \tilde{\mu}, \end{cases} \quad Y(t) = 1 - X(t), \quad X(t) = A \int_t^{\tilde{\mu}} e^{-\frac{2}{3}s^{3/2}} ds, \\ |R_1(x, \varepsilon)| &\leq \varepsilon M, \quad 0 < M - \text{const}, \quad \varepsilon \rightarrow 0, \quad x \in [0, 1]. \end{aligned}$$

Литература

1. Коул, Д.Д. Методы возмущений в прикладной математике / Д.Д. Коул. – М.: Мир, 1972. – 274 с.
2. Зулпукаров, А.З. Метод структурного сращивания для решения краевых задач сингулярно возмущенных уравнений второго порядка: дис. ... канд. физ.-мат. наук / А.З. Зулпукаров. – Ош, 2009. – 114 с.

3. Alymkulov, K. Generalized method of boundary layer function for bisingularly perturbed differential Cole equation / K. Alymkulov, D.A. Tursunov, B.A. Azimov // Far East Journal of Mathematical Sciences (FJMS). – Vol. 101, Issue 3. – pp. 507–516.

4. Ильин, А.М. Асимптотические методы в анализе / А.М. Ильин, А.Р. Данилин. – М.: ФИЗМАТЛИТ. – 2009. – 248 с.

Поступила в редакцию 14 апреля 2017 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2018, vol. 10, no. 1, pp. 21–26*

DOI: 10.14529/mmph180103

ASYMPTOTICS OF SOLUTION OF THE SINGULARLY PERTURBED DIRICHLET PROBLEM WITH A WEAK CRITICAL POINT

D.A. Tursunov, K. Alymkulov, B.A. Azimov

Osh State University, Osh, Kyrgyzstan

E-mail: tdaosh@gmail.com

The Dirichlet problem for a singularly perturbed linear homogeneous ordinary differential equation of second order with a nonsmooth coefficient in real axis is considered. Such problems can be seen in physics, engineering, continuum mechanics, hydrodynamics, etc. Object of the research is to develop the asymptotic technique of boundary functions of Vishik–Lusternik–Vasilyeva–Imanaliev for singularly perturbed differential equations in case when the corresponding non-perturbed equation has nonsmooth solution in the considered area. According to terminology of A.M. Ilyin, such problems are called bisingular. The possibility to use a generalized method of boundary functions for constructing a complete proportional asymptotic expansion of the boundary problem solution for a singularly perturbed linear ordinary differential equation of second order with a weak critical point or an integrable critical point is proved in the article. The constructed expansion of solution is asymptotic in the sense of Erdey. When constructing the proportional asymptotic expansion of the Dirichlet problem, the following methods were used: small parameter method, method of mathematical induction, classical method of boundary functions, and the principle of maximum. Using the principle of maximum, an assessment for the asymptotic expansion's remainder term is obtained, i.e. the proportional complete asymptotic expansion of the solution by small parameter is proved. A specific example is given.

Keywords: asymptotic solution; bisingular problem; Dirichlet problem; small parameter; boundary functions.

References

1. Koul D.D. *Metody vozmushchenii v prikladnoi matematike* (Perturbation Methods in Applied Mathematics), Moscow, Mir Publ., 1972, 274 p. (in Russ.). [Cole J.D. *Perturbation Methods in Applied Mathematics*. Blaisdell Publishing Company, Waltham, Massachusetts, 1968, 260 p.]

2. Zulpukarov A.Z. *Metod strukturnogo srashchivaniia dlia resheniia kraevykh zadach singuliarno vozmushchennykh uravnenii vtorogo poriadka: dissertatsiia kandidata fiziko-matematicheskikh nauk* (The method of structural splicing for solving boundary value problems of singularly perturbed second-order equations: dissertation of the candidate of physical and mathematical sciences), Osh, 2009, 114 p. (in Russ.).

3. Alymkulov K., Tursunov D.A. Azimov B.A. Generalized method of boundary layer function for bisingularly perturbed differential Cole equation. *Far East Journal of Mathematical Sciences (FJMS)*, Vol. 101, Issue 3, pp. 507–516. DOI: 10.17654/MS101030507

4. Ilin A.M., Danilin A.R. *Asimptoticheskie metody v analize* (Asymptotic methods in analysis). Moscow, FIZMATLIT Publ., 2009, 248 p. (in Russ.).

Received April 14, 2017

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ПАРАМЕТРОВ ТЕЧЕНИЯ ВЯЗКОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОЙ ЖИДКОСТИ ПО НЕКОТОРЫМ ИЗМЕРЕНИЯМ НА ЕЕ ПОВЕРХНОСТИ

А.И. Короткий, И.А. Цепелев

*Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского УрО РАН, г. Екатеринбург,
Российская Федерация*

E-mails: korotkii@imm.uran.ru, tsepelev@imm.uran.ru

Определяются физические характеристики установившегося течения вязкой теплопроводной несжимаемой жидкости по измерениям температуры и потока тепла на ее дневной поверхности. Основными искомыми характеристиками являются температура и скорость жидкости во всей модельной области. Задача формализуется как обратная граничная задача для модели течения естественной тепловой конвекции высоковязкой несжимаемой жидкости. Математическая модель течения такой жидкости описывается стационарными уравнениями Навье–Стокса для ньютоновской реологии среды в приближении Буссинеска в поле силы тяжести, уравнением несжимаемости среды, стационарным уравнением сохранения энергии с соответствующими граничными условиями. Плотность и вязкость жидкости нелинейно зависят от ее температуры. Рассматриваемая обратная задача является некорректной и не обладает свойством устойчивости, малое возмущение исходных данных на участке границы, доступной для измерений, приводит к неконтролируемым ошибкам в определении искоемых величин. Для численного решения неустойчивых задач требуется разработка специальных методов. Цель данной работы состоит в построении методов и алгоритмов конструктивного устойчивого численного моделирования решения рассматриваемой обратной задачи. Для реализации этой цели предлагается воспользоваться вариационным методом, который основан на сведении исходной задачи к некоторой экстремальной задаче на минимум подходящего целевого функционала и его устойчивой минимизации каким-либо подходящим способом. При такой стратегии организуется итерационный процесс последовательного численного решения краевых задач граничного управления, которые представляют собой системы дифференциальных уравнений с частными производными с полностью определенными граничными условиями. Для минимизации функционала качества применяется метод сопряженных градиентов в реализации Ролака–Рибьера. Градиент этого функционала и шаг спуска определяются аналитически, что позволяет существенно сократить объем вычислений. Метод конечных объемов применяется для интегрирования систем дифференциальных уравнений с частными производными с различными типами граничных условий. Построенные алгоритмы численного моделирования реализованы в пакете вычислений OpenFOAM. Проведен расчет модельного примера.

Ключевые слова: тепловая конвекция; вязкая жидкость; обратная граничная задача; вариационный метод; численное моделирование.

Введение

Рассматривается задача определения температуры и поля скоростей жидкости, движущейся в некоторой области $\Omega \subset \mathbb{R}^2$, по некоторым заданным условиям на границе области Ω . Математическая модель стационарной тепловой конвекции вязкой несжимаемой неоднородной жидкости включает в себя стационарное уравнение Навье–Стокса вместе с уравнением несжимаемости для

определения поля скоростей жидкости и стационарное уравнение теплового баланса для определения ее температуры. На границе $\Gamma = \partial\Omega$ пространственной области задаются соответствующие граничные условия для скорости и температуры. При этом некоторые граничные условия задаются только на части границы (условия с недостатком), а на других участках границы задаются дополнительные условия (условия с избытком). Соответствующую краевую задачу для определения поля скоростей и температуры в области Ω назовем обратной граничной задачей (или просто обратной задачей).

Рассматриваемая обратная задача является некорректной в том, что и не обладает свойством устойчивости [1, 2], малое возмущение исходных данных на участке границы с переопределением приводит к неконтролируемым ошибкам в реконструкции искомым величин. Для численного решения неустойчивых задач требуется разработка специальных методов и алгоритмов. В данной работе будет представлен конструктивный метод устойчивого численного решения рассматриваемой обратной задачи. Этот метод основан на сведении исходной некорректной задачи к вариационной задаче на минимум целевого функционала среднеквадратичной невязки [1–3]. Для решения экстремальной задачи выбрана одна из реализаций метода сопряженных градиентов. При таком алгоритме решения исходная задача заменяется на последовательное решение аналитически полученных краевых задач граничного управления, для которых соответствующие граничные данные определены полностью.

Обратные задачи восстановления тепловых режимов в геофизических процессах составляют новое направление в моделировании различных технологических и природных процессов (см., например, [4–9]). Необходимо отметить большой интерес к решению подобных задач среди специалистов в области моделирования геодинамических процессов, процессов химического синтеза и многих других отраслей знаний [7–9]. Этому способствует совершенствование методов обработки данных и накопление статистической информации о природном процессе или явлении. Решение обратных задач на сегодняшний день довольно наукоемко и сопряжено с большими затратами ресурсов ЭВМ. Благодаря сочетанию аналитических методов теории управления с алгоритмами численного решения систем дифференциальных уравнений с частными производными, в данной работе удалось получать результаты хорошего качества при сравнительно небольших затратах на компьютерную реализацию. Результаты данного численного моделирования могут дополнить уже известные методы исследования природных процессов распространения потоков вулканической лавы. Некоторые вопросы разрешимости задач граничного управления, необходимые и достаточные условия оптимальности и процедуры их численного решения исследованы в [7, 8].

Проведены серии вычислительных экспериментов, показавших работоспособность и эффективность предложенного метода. Работа продолжает исследования [9, 11].

Постановка задачи

В области $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ с границей $\Gamma = \partial\Omega$ рассматривается установившееся конвективное движение вязкой несжимаемой неоднородной теплопроводной жидкости, находящейся в поле силы тяжести. Математическая модель представлена следующими безразмерными уравнениями в приближении Буссинеска [4]:

$$-\text{Re}\langle \mathbf{u}, \nabla \rangle \mathbf{u} + \nabla \cdot \left(\mu \left(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T \right) \right) = \nabla p - RaT \mathbf{e}_2, \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0, \quad (2)$$

$$\nabla \cdot (\kappa \nabla T) = \langle \mathbf{u}, \nabla T \rangle, \quad (3)$$

где $\mathbf{x} \in \Omega$ – точка пространства; $\mathbf{u} = (u_1(\mathbf{x}); u_2(\mathbf{x}))$ – вектор скорости; $T = T(\mathbf{x})$ – температура; $p = p(\mathbf{x})$ – давление; $\mu = \mu(T)$ – вязкость; $\kappa(T) = k(T) / (c\rho_*)$ – коэффициент температуропроводности; ρ_* – температурно независимая плотность; $k = k(T)$ – коэффициент теплопроводности; c – удельная теплоемкость; Ra – число Рэлея [3, с. 7]; Re – число Рейнольдса [4, с. 87]; $\mathbf{e}_2 = (0, 1)$ – единичный вектор; T – транспонирование тензора; $\langle \bullet, \bullet \rangle$ – скалярное произведение векторов; ∇ – градиент; $\nabla \bullet$ – дивергенция.

На границе $\Gamma = \bar{\Gamma}_1 \cup \bar{\Gamma}_2 \cup \bar{\Gamma}_3 \cup \bar{\Gamma}_4$ (см. рис. 1) рассматриваются следующие граничные условия:

$$\begin{aligned} \Gamma_1: & \quad T = T_1, & \quad \langle \nabla p, \mathbf{n} \rangle = 0, \\ \Gamma_2: & \quad \langle \nabla T, \mathbf{n} \rangle = 0, & \quad \mathbf{u} = 0, & \quad \langle \nabla p, \mathbf{n} \rangle = 0, \\ \Gamma_3: & \quad \langle \nabla T, \mathbf{n} \rangle = 0, & \quad \langle \nabla \mathbf{u}, \mathbf{n} \rangle = 0, & \quad p = 0, \\ \Gamma_4: & \quad T = T_4, -k \langle \nabla T, \mathbf{n} \rangle = \varphi, & \quad \langle \mathbf{u}, \mathbf{n} \rangle = 0, & \quad \sigma \mathbf{n} - \langle \sigma \mathbf{n}, \mathbf{n} \rangle \mathbf{n} = 0, \langle \nabla p, \mathbf{n} \rangle = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

где $\sigma \equiv \mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)$ – тензор вязких напряжений. На границе Γ_1 жидкость вытекает с априори известной температурой T_1 , и ее скорость на этой границе считается неизвестной. На границе Γ_3 она вытекает, напряжения равны нулю, и теплообмен осуществляется только с потоком жидкости. На границе Γ_4 проводятся измерения температуры T_4 и потока тепла φ , для скорости заданы условия непротекания и идеального скольжения. На нижней границе Γ_2 области заданы условия теплоизолированности для температуры и прилипания для скорости.

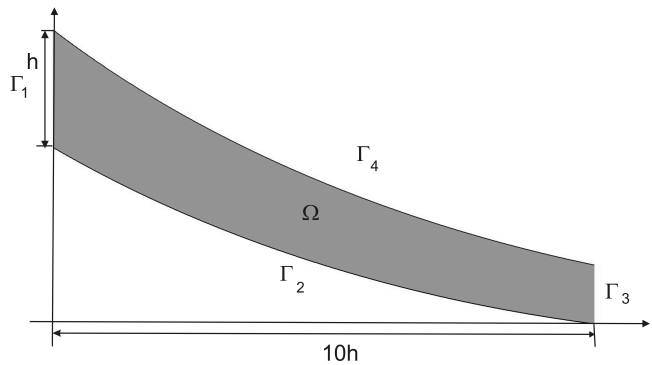


Рис. 1. Расчетная область Ω

Наша конкретная обратная граничная задача состоит в том, чтобы по результатам измерений на Γ_4 температуры и теплового потока найти температуру и поле скоростей жидкости во всей области Ω , т. е. требуется найти решение задачи (1)–(4).

Задача (1)–(4) обладает свойством неустойчивости [11]. Если эту задачу решать численно, то малые ошибки в измерениях исходных данных задачи, в частности, ошибки при измерении наблюдаемых величин температуры T_4 и теплового потока $\varphi = -k(T) \partial T / \partial \mathbf{n}$ на Γ_4 и промежуточные вычислительные погрешности приводят к неконтролируемым вычислительным ошибкам при определении температуры и других искомым величин в исходной задаче. Поэтому для этой задачи разрабатываются специальные устойчивые численные методы.

Обратной задаче (1)–(4) поставим в соответствие вспомогательную задачу граничного управления, которую будем называть прямой задачей. Эта задача в расчетной области описывается системой уравнений (1)–(3) со следующими граничными условиями:

$$\begin{aligned} \Gamma_1: & \quad T = T_1, & \quad \mathbf{u} = \xi, & \quad \langle \nabla p, \mathbf{n} \rangle = 0, \\ \Gamma_2: & \quad \langle \nabla T, \mathbf{n} \rangle = 0, & \quad \mathbf{u} = 0, & \quad \langle \nabla p, \mathbf{n} \rangle = 0, \\ \Gamma_3: & \quad \langle \nabla T, \mathbf{n} \rangle = 0, & \quad \langle \nabla \mathbf{u}, \mathbf{n} \rangle = 0, & \quad p = 0, \\ \Gamma_4: & \quad T = T_4, & \quad \langle \mathbf{u}, \mathbf{n} \rangle = 0, & \quad \sigma \mathbf{n} - \langle \sigma \mathbf{n}, \mathbf{n} \rangle \mathbf{n} = 0, \langle \nabla p, \mathbf{n} \rangle = 0. \end{aligned} \quad (5)$$

С содержательной стороны данная прямая задача состоит в определении температуры и скорости вязкой жидкости в заданной области определения. Известны все соответствующие граничные данные в модели (5). Также искомыми характеристиками в этой задаче являются давление, вязкость и коэффициент температуропроводности. Вопросы математической корректности данной прямой задачи исследованы в работах [4, 11].

Метод решения обратной задачи

Для построения алгоритма решения задачи перейдем к вариационной постановке обратной задачи [6–9]. Пусть наблюдаемый поток тепла φ на Γ_4 в обратной задаче соответствует некоторому заранее неизвестному распределению скорости (управляющему параметру) $\mathbf{u} = \xi$ на границе Γ_1 в прямой задаче (1)–(3), (5). Обозначим \mathbf{u}^* – компоненту скорости решения прямой задачи (T^*, \mathbf{u}^*, P^*) в области Ω при заданном условии на границе Γ_1 в (5) таком, что $\varphi = -k(T^*) \partial T^* / \partial \mathbf{n}$

на Γ_4 . Пусть V – некоторое множество допустимых распределений скоростей на Γ_1 , включающий в себя элемент ξ^* . Рассмотрим функционал качества

$$J(\xi) = \int_{\Gamma_4} \left(k(T_\xi) \langle \nabla T_\xi, \mathbf{n} \rangle - \varphi \right)^2 d\Gamma, \quad \xi \in V,$$

где T_ξ – компонента решения прямой задачи с условием $\mathbf{u} = \xi$ на Γ_1 в (5). Для искомого решения задачи данный функционал должен принимать нулевое значение при $\xi = \xi^*$, $J(\xi^*) = 0$. Искомое граничное управление ξ^* на Γ_1 является минимизирующим элементом в вариационной задаче

$$J(\xi) \rightarrow \min : \xi \in V. \quad (6)$$

Таким образом, от решения обратной задачи можно перейти к решению вариационной задачи (6). Для решения данной задачи применим устойчивый итерационный метод сопряженных градиентов Полака–Рибьера [10]. Метод сопряженных градиентов является одним из наиболее эффективных градиентных методов, если рассматривать такие критерии, как точность результатов, затраты компьютерных ресурсов и реализацию его на современных ЭВМ.

Последовательность аппроксимаций задачи (6) строится по правилу:

$$\begin{aligned} \xi^{(n+1)} &= \xi^{(n)} + \gamma^{(n)} \mathbf{d}^{(n)}, \quad n=1, 2, 3, \dots, \\ \mathbf{d}^{(n)} &= \begin{cases} -\nabla J(\xi^{(n)}), & n=1, \\ -\nabla J(\xi^{(n)}) + \beta^{(n)} \mathbf{d}^{(n-1)}, & n=2, 3, \dots, \end{cases} \\ \beta^{(n)} &= \left\langle \nabla J(\xi^{(n)}), \nabla J(\xi^{(n)}) - \nabla J(\xi^{(n-1)}) \right\rangle_{\Gamma_1} \left\| \nabla J(\xi^{(n-1)}) \right\|_{\Gamma_1}^{-2}, \quad n=2, 3, \dots, \\ \gamma^{(n)} &= - \left\langle \mathbf{d}^{(n)}, \nabla J(\xi^{(n)}) \right\rangle_{\Gamma_1} \left\| \nabla \mathbf{A}(\xi^{(n)}) \mathbf{d}^{(n)} \right\|_{\Gamma_4}^{-2}, \\ \nabla J(\xi) &= q\mathbf{n} - \mu(T_\xi) \left(\nabla \mathbf{w} + \nabla \mathbf{w}^T \right) \Big|_{\Gamma_1}, \\ \nabla \mathbf{A}_\xi \mathcal{X} &= \left\langle \nabla \omega, \mathbf{n} \right\rangle \Big|_{\Gamma_4}, \end{aligned} \quad (7)$$

где (\mathbf{w}, q) – компонента решения (\mathbf{w}, z, q) сопряженной задачи

$$\begin{aligned} -\operatorname{Re} \left(\nabla \mathbf{u}_\xi^T \mathbf{w} - \nabla \mathbf{w} \mathbf{u}_\xi \right) + \nabla \cdot \left(\mu(T_\xi) \left(\nabla \mathbf{w} + \nabla \mathbf{w}^T \right) \right) &= \nabla q + z \nabla T_\xi, \\ \nabla \cdot \mathbf{w} &= 0, \\ \nabla \cdot \left(\kappa(T_\xi) \nabla z \right) + \left\langle \mathbf{u}_\xi, \nabla z \right\rangle + Ra \left\langle \mathbf{w}, \mathbf{e}_2 \right\rangle &= \mu'(T_\xi) \frac{1}{2} \left[\nabla \mathbf{w} + \nabla \mathbf{w}^T, \nabla \mathbf{u}_\xi + \nabla \mathbf{u}_\xi^T \right] + \kappa'(T_\xi) \left\langle \nabla T_\xi, \nabla z \right\rangle; \end{aligned} \quad (9)$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned} \Gamma_1 \cup \Gamma_2 : \quad z &= 0, & \mathbf{w} &= 0, \quad \langle \nabla q, \mathbf{n} \rangle = 0, \\ \Gamma_3 : \quad z &= 0, & \langle \nabla \mathbf{w}, \mathbf{n} \rangle &= 0, \quad q = 0, \quad k(T_\xi) = 0, \\ \Gamma_4 : \quad z &= 2 \left(k(T_\xi) \langle \nabla T_\xi, \mathbf{n} \rangle - \varphi \right), & \mathbf{w} &= 0, \quad \langle \nabla q, \mathbf{n} \rangle = 0, \end{aligned} \quad (10)$$

и ω – компонента решения (\mathbf{v}, ω, p) следующей задачи:

$$\begin{aligned} -\operatorname{Re} \left(\langle \mathbf{v}, \nabla \rangle \mathbf{u}_\xi + \langle \mathbf{u}_\xi, \nabla \rangle \mathbf{v} \right) + \nabla \cdot \left(\mu_\xi \tilde{\sigma} \right) + \nabla \cdot \left(\mu'(T_\xi) \omega \left(\nabla \mathbf{u}_\xi + \nabla \mathbf{u}_\xi^T \right) \right) &= \nabla p - Ra \omega \mathbf{e}_2, \\ \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0, \\ \langle \mathbf{v}, \nabla T_\xi \rangle + \langle \mathbf{u}_\xi, \nabla \omega \rangle &= \nabla \cdot \left(\kappa_\xi \nabla \omega \right) + \nabla \cdot \left(\kappa'(T_\xi) \omega \nabla T_\xi \right); \end{aligned} \quad (11)$$

с граничными условиями:

$$\begin{aligned} \Gamma_1 : \quad \omega &= 0, & \mathbf{v} &= \chi, & \langle \nabla p, \mathbf{n} \rangle &= 0, \\ \Gamma_2 : \quad \langle \nabla \omega, \mathbf{n} \rangle &= 0, & \mathbf{v} &= 0, & \langle \nabla p, \mathbf{n} \rangle &= 0, \\ \Gamma_3 : \quad \langle \nabla \omega, \mathbf{n} \rangle &= 0, & \langle \nabla \mathbf{v}, \mathbf{n} \rangle &= 0, & p &= 0, \\ \Gamma_4 : \quad \omega &= 0, & \langle \mathbf{v}, \mathbf{n} \rangle &= 0, & \tilde{\sigma} \mathbf{n} - \langle \tilde{\sigma}, \mathbf{n} \rangle \mathbf{n} &= 0, \quad \langle \nabla p, \mathbf{n} \rangle = 0, \quad \tilde{\sigma} = \nabla \mathbf{v} + \nabla \mathbf{v}^T. \end{aligned} \quad (12)$$

Вывод сопряженной задачи основан на линеаризации функций $k(T_{\xi+\chi}) = k(T_{\xi}) + k'(T_{\xi})T + o(\|\chi\|)$ и $\mu(T_{\xi+\chi}) = \mu(T_{\xi}) + \mu'(T_{\xi})T + o(\|\chi\|)$, где $T_{\xi+\chi}, T_{\xi}$ компоненты решений $(T_{\xi+\chi}, \mathbf{u}_{\xi+\chi}, p_{\xi+\chi})$ и $(T_{\xi}, \mathbf{u}_{\xi}, p_{\xi})$ прямой задачи (1)–(3), (5) для граничных условий $\mathbf{u} = \xi + \chi$ и $\mathbf{u} = \xi$ на границе Γ_1 соответственно (см. также [8]). Для вычисления шага спуска в (8), нелинейный оператор $\mathbf{A}_{\xi} : \xi \in L_2^2(\Gamma_1) \rightarrow k(T_{\xi}) \langle \nabla T_{\xi}, \mathbf{n} \rangle \in L_2(\Gamma_4)$ для $\mathbf{u} = \xi + \chi$ на Γ_1 аппроксимируется выражением $\mathbf{A}_{\xi+\chi}(\xi + \chi) \approx \mathbf{A}_{\xi}(\xi) + \nabla \mathbf{A}_{\xi}(\xi)\chi$.

Таким образом, решение исходной неустойчивой задачи (1)–(4) заменяется на устойчивый итерационный метод сопряженных градиентов решения задачи (7). Прямая задача (1)–(3), (5) и сопряженная к ней задача (9), (10) позволяют аналитически выписать и достаточно просто вычислить градиент функционала для метода сопряженных градиентов, а задача (11), (12) позволяет вычислить шаг спуска в методе. Основная вычислительная нагрузка в реализации метода лежит на достаточно качественном и быстром решении задач граничного управления. Вопросы разрешимости таких задач (математическая корректность) исследованы в работе [11]. При достаточно большом числе Рэлея (например, большем 10^6) итерационный метод решения прямой задачи (совместного определения поля скоростей, давления и температуры) в (1)–(3), (5) или аналогично в (9), (10) и (11), (12) замедляет сходимость и на некоторых исходных данных (например, при скачке вязкости от 1 до 10^6) демонстрирует расходимость. Этот факт накладывает на метод соответствующие ограничения в его применимости.

Численное моделирование

Для тестирования приведенного алгоритма были разработаны программные коды в пакете OpenFOAM (*Open Source Field Operation And Manipulation*). Данный пакет – это объектно-ориентированная платформа, в которой на языке программирования C++ реализован широкий набор эффективных процедур аппроксимации дифференциальных операторов с различными типами граничных условий, полученных в моделях механики жидкости и газа, а также алгоритмов решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ), которые возникают после дискретизации краевых задач в пространственных областях с различной геометрией. В программные коды легко вносить изменения при изменении исходной математической модели и замене структуры вычислительного кластера. Информация о возможностях пакета представлена на официальном сайте разработчика [12].

Задачи граничного управления дискретизировались методом конечных объемов. Демонстрируемый пример рассчитывался на сетке из 10^4 полиэдральных ячеек. Для определения поля скоростей и давления при заданном распределении температуры применялся SIMPLE-алгоритм (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*) [13]. Тестовые расчеты показывают, что полиэдральная сетка имеет преимущества в качестве перед гексаэдральной (что оказывает существенное влияние на скорость сходимости SIMPLE метода) и преимущества в размерности дискретных задач перед тетраэдральной сеткой (что значительно сокращает время расчетов). Для реализации данного алгоритма решались СЛАУ с положительно определенными и симметричными матрицами с реализацией многосеточного метода GAMG (*Geometric Agglomerated Algebraic Multigrid*) [14]. После дискретизации уравнения теплового баланса для решения СЛАУ применялся бинаправленный метод сопряженных градиентов [15]. Линейная схема Гаусса с коррекцией потока выбиралась везде для аппроксимации операторов Лапласа для аппроксимации конвективного оператора, который является доминирующим – TVD схема с ограничителем minmod [16], что обеспечивает монотонность вычисляемых аппроксимаций температуры. Для расчетов использовалось одно ядро CPU Intel Core i5, 2,6 GHz, RAM 16 MB, OS Linux. Тестовый пример рассчитывается примерно 5 мин.

Для проведения вычислительного теста фиксируем следующие характерные значения параметров в модели, соответствующие усредненным значениям в потоке вулканической лавы [8, 9, 17, 18]: $\alpha = 10^{-5} \text{ K}^{-1}$, $g = 9,8 \text{ м/с}^2$, $h = 10 \text{ м}$, $\rho_{ref} = 2950 \text{ кг/м}^3$, $\mu_{ref} = 3,5 \cdot 10^6 \text{ Па с}$, $T_{ref} = 300 \text{ К}$, $T_* = 1473 \text{ К}$, $\Delta T = 100 \text{ К}$, $\kappa_{ref} = 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$, $c_{ref} = 1200 \text{ Дж/кг К}$, $u_{ref} = 10^{-3} \text{ м/с}$, вычисляем значения $Ra \approx 27000$, $Re \approx 2,75 \cdot 10^{-9}$.

Зависимость вязкости от температуры учитывает кристаллизацию жидкости при понижении температуры

$$\mu(T) = \min\left(10^6, \exp(n(T_* - T))\tilde{\eta}(\phi(T)/\phi_*)\right),$$

где $\exp(n(T_* - T))$ учитывает зависимость вязкости жидкости от температуры, и $\tilde{\eta}(\phi(T)/\phi_*)$ учитывает ее кристаллизацию (аналитическая зависимость рассматривалась в [17]).

Зависимость коэффициента теплопроводности от температуры выражается формулой [18]

$$k(T) = \begin{cases} 1,15 + 5,9 \cdot 10^{-7} (T - \tilde{T})^2, & T < \tilde{T}, \\ 1,15 + 9,7 \cdot 10^{-6} (T - \tilde{T})^2, & T > \tilde{T}. \end{cases}$$

Зависимость вязкости и коэффициента теплопроводности от температуры показана на рис. 2.

Для проверки качества вычисления градиента функционала в задаче проводился следующий тест [19]. Для некоторого значения управления ξ на Γ_1 ($\xi \neq \xi^*$) вычислим вектор $\varepsilon \nabla J(\xi) / \|\nabla J(\xi)\|$, где $\varepsilon \in [10^{-9}, 0]$ и рассмотрим функцию

$$\nu(\varepsilon) = \frac{J(\xi + \varepsilon \nabla J(\xi) / \|\nabla J(\xi)\|) - J(\xi)}{\varepsilon \|\nabla J(\xi)\|} = 1 + O(\varepsilon).$$

На рис. 3 функция $\nu(\varepsilon)$ принимает значения близкие к единице в диапазоне параметра $\varepsilon \in [10^{-7}, 10^{-1}]$, что демонстрирует качественное вычисление градиента функционала невязки через решение прямой и сопряженной задач.

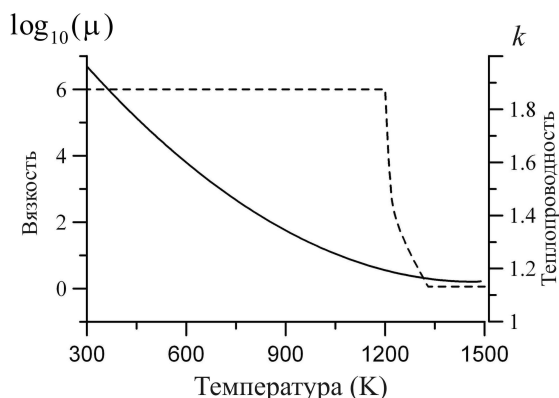


Рис. 2. Зависимости вязкости (пунктирная линия) и коэффициента теплопроводности (сплошная линия) от температуры

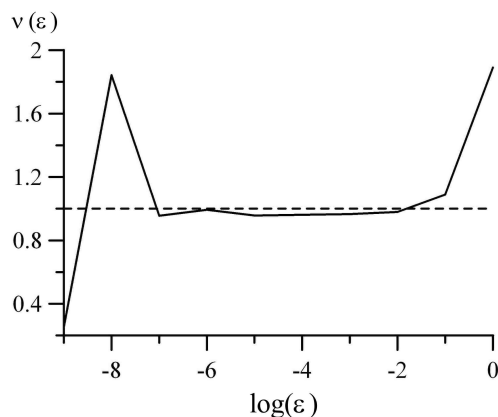


Рис. 3. Тест качества вычисления градиента функционала

Ранее в работе [9] рассматривалась аналогичная задача восстановления теплового поля в модели (1)–(4). Данная методика применялась в задаче восстановления характеристик лавового потока без учета кристаллизации вещества. В качестве управляющего параметра была выбрана температура жидкости на нижней границе области. Было установлено, что в случае доминирования диффузии в модели метод решения из [9] позволяет получить качественное восстановление искомых характеристик. Однако при увеличении магнитуды скорости наведенной конвекции точность вычисления градиента функционала падает (что проявляется в том, что не удается стабилизировать функцию $\nu(\varepsilon)$ близко к единице), и в методе сопряженных градиентов не удается гарантировать устойчивую сходимость аппроксимаций и получить качественное решение задачи. Подход, предлагаемый в данной работе, является альтернативным, позволяет проводить расчеты в широком диапазоне величины скорости течений жидкости и дополняет ранее изложенные результаты.

При решении обратной задачи методами сопряженных градиентов было замечено, что невязка на первых итерациях убывает довольно быстро, но затем, когда устойчивые аппроксимации

довольно близко подходят к искомому решению, изменения невязки резко падает. Поведение итерационного процесса, демонстрируемого на рис. 4, является типичным для такого рода задач. Учитывая тот факт, что (8) является решением нелинейной экстремальной задачи $\gamma^{(n)} = \operatorname{argmin}\{J(\xi^{(n+1)}) : \gamma^{(n)} > 0\}$, для контроля качества итерационного процесса мы рассматривали неравенство $J(\xi^{(i)}) \geq J(\xi^{(i+1)})$ и останавливали процесс при выполнении равенства $J(\xi^{(i+1)}) / J(\xi^{(i)}) = \varepsilon_0$, где ε_0 выбирается близким к 1, например, 0,99. При этом приемлемое решение задачи достигалось за 20 итераций. В тестовом расчете принималось $\xi^*(\mathbf{x}) = 1000\mathbf{e}_1$, $\xi^{(0)}(\mathbf{x}) = 100\mathbf{e}_1$, $\mathbf{x} \in \Gamma_1$. На рис. 5 изображены погрешности восстановления температуры $J_T = \|T^{(N)} - T^*\|_{L_2(\Omega)} / \|T\|_{L_2(\Gamma_1)}$ и скорости $J_U = \|\mathbf{u}^{(N)} - \xi^*\|_{L_2(\Omega)} / \|\xi^*\|_{L_2(\Gamma_1)}$ в расчетной области.

Заключение

В работе был предложен подход к численному решению некорректной обратной граничной задачи конвективного течения вязкой несжимаемой жидкости, устойчивый к погрешностям вычислений. Алгоритм решения основан на сочетании аналитических методов исследования задач граничного управления и эффективных устойчивых методов решения экстремальных задач. Построен численный метод совместного решения стационарного уравнения Навье–Стокса, уравнения несжимаемости и уравнения теплового баланса с нелинейными коэффициентами, и различными типами граничных условий на неструктурированных сетках. Реализация алгоритма в пакете OpenFOAM позволила создать программные коды для решения рассматриваемой задачи, соответствующие современному уровню развития вычислительной техники, в том числе на параллельных вычислительных кластерах. Проведены численные расчеты характерного примера обратной задачи.

Работа выполнена при поддержке Комплексной программы фундаментальных научных исследований УрО РАН (проект 18-1-1-8).

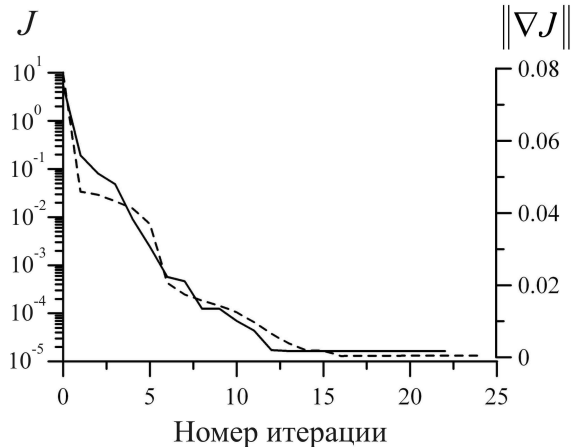


Рис. 4. Функционал качества (сплошная линия) и его градиент (пунктирная линия)

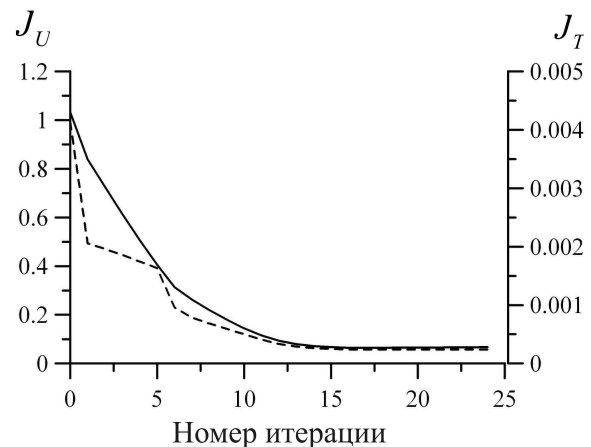


Рис. 5. Качество восстановления температуры J_T (пунктирная линия) и скорости J_U (сплошная линия)

Литература

1. Тихонов, А.Н. Методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. – М.: Наука, 1979. – 285 с.
2. Иванов, В.К. Теория линейных некорректных задач и её приложения / В.К. Иванов, В.В. Васин, В.П. Танана. – М.: Наука, 1978. – 206 с.
3. Васильев, Ф.П. Методы оптимизации / Ф.П. Васильев. – М.: Факториал Пресс, 2002. – 824 с.
4. Chandrasekhar, S. Hydrodynamic and hydromagnetic stability / S. Chandrasekhar. – Oxford: Clarendon Press, 1961. – 654 p.
5. Ландау, Л.Д. Гидродинамика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Наука, 1986. – 736 с.
6. Короткий, А.И. Реконструкция граничных режимов в обратной задаче тепловой конвекции высоковязкой жидкости / А.И. Короткий, Д.А. Ковтунов // Тр. ИММ УрО РАН. – 2006. – Т. 12, № 2. – С. 88–97.
7. Короткий, А.И. Моделирование прямых и обратных граничных задач для стационарных моделей тепломассопереноса / А.И. Короткий, Ю.В. Стародубцева. – Екатеринбург: Издательство Уральского университета, 2015. – 168 с.
8. Ismail-Zadeh, A. Data-driven numerical modelling in geodynamics: methods and applications / A. Ismail-Zadeh, A. Korotkii, I. Tsepelev. – Berlin: Springer International Publishing, 2016. – 105 p.
9. Quantitative reconstruction of thermal and dynamic characteristics of volcanic lava from surface thermal measurements / A. Korotkii, D. Kovtunov, A. Ismail-Zadeh *et al.* // *Geophysical Journal International*. – 2016. – Vol. 205. – Issue 3. – P. 1767–1779.
10. Nocedal, J. Numerical optimization / J. Nocedal, S.J. Wright. – New York: Springer, 1999. – 664 p.
11. Короткий, А.И. Оптимальное граничное управление системой, описывающей тепловую конвекцию / А.И. Короткий, Д.А. Ковтунов // Тр. ИММ УрО РАН. – 2010. – Т. 16, № 1. – С. 76–101.
12. <http://www.openfoam.org/>
13. Issa, R.I. Solution of implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting / R.I. Issa // *J. Comput. Phys.* – 1986. – Vol. 62. – Issue 1. – P. 40–65.
14. Wesseling, P. Geometric multigrid with applications to computational fluid dynamics / P. Wesseling, C.W. Oosterlee // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. – 2001. – Vol. 128. – Issue 1-2. – P. 311–334.
15. Van der Vorst, H.A. BI-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems / H.A. van der Vorst // *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*. – 1992. – Vol. 13. – № 2. – P. 631–644.
16. Sweby, P.K. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws / P.K. Sweby // *SIAM Journal on Numerical Analysis*. – 1984. – Vol. 21. – Issue 5. – P. 995–1011.
17. Costa, A. A model for the rheology of particle-bearing suspensions and partially molten tocks / A. Costa, L. Caricchi, N. Bagdassarov // *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*. – 2009. – Vol. 10, № 3. – Q03010.
18. Hidaka, M. VTFS project: Development of the lava flow simulation code LavaSIM with a model for three-dimensional convection, spreading, and solidification / M. Hidaka, A. Goto, S. Umino, E. Fujita // *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*. – 2005. – Vol. 6, № 7. – Q07008.
19. Navon, I.M. Variational data assimilation with an adiabatic version of the NMC spectral model / I.M. Navon, X. Zou, J. Derber, J. Sela // *Monthly Weather Review*. – 1992. – Vol. 120, № 7. – P. 1433–1446.

Поступила в редакцию 3 октября 2017 г.

RECOVERY OF FLOW PARAMETERS OF VISCOUS HEAT-CONDUCTING FLUID BY SOME CHANGES AT ITS SURFACE

A.I. Korotkii, I.A. Tsepelev

N.N. Krasovskii Institute of Mathematics and Mechanics of the Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russian Federation

E-mails: korotkii@imm.uran.ru, tsepelev@imm.uran.ru

Physical characteristics of steady motion of viscous heat-conducting incompressible fluid by changes of temperature and heat flow on its daylight surface are determined in the article. The main desired characteristics are temperature and fluid velocity in the entire simulation area. The problem is formalized as an inverse boundary problem for the flow model of natural thermal convection of highly viscous incompressible fluid. The mathematical flow model of such fluid is described by a stationary Navier-Stokes equations for Newtonian rheology of a medium in Boussinesq approximation in the field of gravity, by the medium incompressibility equation, stationary equation of energy conservation with corresponding boundary conditions. Density and viscosity of the fluid have non-linear dependence on its temperature. The considered inverse problem is incorrect and does not possess the property of stability; small perturbation of initial data on the section of the boundary available for measurement leads to uncontrolled errors in determining the desired values. For numerical solution of unstable problems special methods should be developed. The goal of the article is in developing methods and algorithms of constructive sustainable numerical simulation of the considered inverse problem's solution. In order to implement this goal, the use of variational method, which is based on reduction of the initial problem to some extremum problem on the minimum of the appropriate objective functional and its sustainable minimization by some appropriate technique, is proposed. Using this strategy, an iteration process of sequential numerical solution of boundary problems of boundary control, which are systems of differential equations with partial derivatives with completely determined boundary conditions, is organized. In order to minimize quality functional, the Polac–Ribiere conjugate gradient method is used. This functional's gradient and the descent step are determined analytically which allows significantly decreasing the volume of calculations. The method of finite volumes is used for integrating the systems of differential equations with partial derivatives with various types of boundary conditions. The developed algorithms of numerical simulation are implemented in the OpenFOAM calculations package. Calculation of the simulated example is carried out.

Keywords: thermal convection; viscous fluid; inverse boundary problem; variational method; numerical simulation.

References

1. Tikhonov A.N., Arsenin V.Y. *On the solution of ill-posed problems*. New York: John Wiley and Sons, 1977, 258 p.
2. Ivanov V.K., Vasin V.V., Tanana V.P. *Teoriya lineynykh nekorrektnykh zadach i eye prilozheniya* (Theory of linear ill-posed problems and its applications). Moscow, Nauka Publ., 1978, 206 p. (in Russ.).
3. Vasiliev F.P. *Metody optimizatsii* (Optimization methods). Moscow, Faktorial Publ., 2002, 824 p. (in Russ.).
4. Chandrasekhar S. *Hydrodynamic and hydromagnetic stability*. Oxford, Clarendon Press, 1961, 654 p.
5. Landau L.D., Lifshitz E.M. *Fluid Mechanics*. Pergamon, 1987, 554 p.
6. Korotkii A.I., Kovtunov D.A. *Rekonstruktsiya granichnykh rezhimov v obratnoy zadache teplovoiy konveksii vysokovязkoy zhidkosti* (Reconstruction of boundary regimes in an inverse problem of

thermal convection of a high viscous fluid). *Trudy Instituta Matematiki i Mehaniki UrO RAN*, 2006, Vol. 12, no. 2, pp. 88–97. (in Russ.).

7. Korotkii A.I., Starodubtseva Yu.V. *Modelirovanie pryamykh i obratnykh granichnykh zadach dlya statsionarnykh modeley teplomassoperenosa* (Modelling of direct and inverse problems for models of stationary heat and mass transfer). Yekaterinburg, Izdatelstvo Uralskogo universiteta Publ., 2015, 168 p. (in Russ.).

8. Ismail-Zadeh A., Korotkii A., Tsepelev I. *Data-driven numerical modelling in geodynamics: methods and applications*. Berlin: Springer International Publishing, 2016, 105 p. DOI:10.1007/978-3-319-27801-8

9. Korotkii A., Kovtunov D., Ismail-Zadeh A., Tsepelev I., Melnik O. Quantitative reconstruction of thermal and dynamic characteristics of volcanic lava from surface thermal measurements. *Geophysical Journal International*, 2016, Vol. 205, Issue 3, pp. 1767–1779. DOI:10.1093/gji/ggw117

10. Nocedal J., Wright S.J. *Numerical optimization*. New York, Springer, 1999, 664 p.

11. Korotkii A.I., Kovtunov D.A. Optimal boundary control of a system describing thermal convection. *Proceedings of the Steklov Institute of Mathematics (Supplementary issues)*, 2011, 272, suppl. 1, pp. 74–100.

12. <http://www.openfoam.org/>

13. Issa R.I. Solution of implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. *Journal of Computational Physics*, 1986, Vol. 62, Issue 1, pp. 40–65. DOI: 10.1016/0021-9991(86)90099-9

14. Wesseling P., Oosterlee C.W. Geometric multigrid with applications to computational fluid dynamics. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2001, Vol. 128, Issue 1-2, pp. 311–334. DOI: 10.1016/S0377-0427(00)00517-3

15. Van der Vorst H.A. BI-CGSTAB: A fast and smoothly converging variant of BI-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 1992, Vol. 13, no. 2, pp. 631–644. DOI: 10.1137/0913035

16. Sweby P.K. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 1984, Vol. 21, Issue 5, pp. 995–1011. DOI: 10.1137/0721062

17. Costa A., Caricchi L., Bagdassarov N. A model for the rheology of particle-bearing suspensions and partially molten tocks. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 2009, Vol. 10, no. 3, Q03010. DOI: 10.1029/2008GC002138

18. Hidaka M., Goto A., Umino S., Fujita E. VTFS project: Development of the lava flow simulation code LavaSIM with a model for three-dimensional convection, spreading, and solidification. *Geochemistry, Geophysics, Geosystems*, 2005, Vol. 6, no. 7, Q07008. DOI:10.1029/2004GC000869

19. Navon I.M., Zou X., Derber J., Sela J. Variational data assimilation with an adiabatic version of the NMC spectral model. *Monthly Weather Review*, 1992, Vol. 120, no. 7, pp. 1433–1446. DOI: 10.1175/1520-0493(1992)120<1433:VDAA>2.0.CO;2

Received October 3, 2017

РАЗРАБОТКА МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ МАССОПЕРЕНОСА КОМПОНЕНТ ВОДНО-СОЛЕВОГО РАСТВОРА В ПУЧИНИСТЫХ ГРУНТАХ НА ОСНОВАНИИ КИНЕТИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ ЖИДКОСТЕЙ

Е.В. Марков¹, С.А. Пульников¹, А.Д. Гербер²

¹Тюменский индустриальный университет, г. Тюмень, Российская Федерация

²Тюменское высшее военное-инженерное командное училище, г. Тюмень, Российская Федерация
E-mail: markov.ev@mail.ru

Надежность инженерных сооружений во многом зависит от способности сопротивляться неблагоприятным факторам внешней среды. Одним из наиболее опасных геологических процессов является морозное пучение грунтов, которое способно развивать огромные давления и значительные неравномерные вертикальные деформации. Особенно опасны такие процессы для нежестких сооружений с отрицательной среднегодовой температурой ($-6...-0,5$ °С), например, для подземных газо- и конденсаторов. Под действием давления морозного пучения трубопроводы испытывают сильные изгибы на коротких участках, что зачастую приводит к аварийным инцидентам. Для прогнозирования морозного пучения необходимо решить задачу массопереноса грунтового водно-солевого раствора из талой зоны в мерзлую.

С использованием кинетической теории жидкости авторы статьи разработали математическую модель массопереноса воды и соли в талых, промерзающих и мерзлых грунтах. Модель позволяет в явном виде определить вклад различных механизмов массопереноса: термодиффузия, концентрационная диффузия, фильтрация. Полученные в работе уравнения диффузионного переноса позволяют учитывать неодинаковую подвижность молекул в адсорбированной плёнке. Дополнительно было показано, что классическое выражение для плотности диффузионного потока справедливо только в частном случае равенства коэффициентов диффузии каждого компонента в соответствии с кинетической теорией жидкости.

Ключевые слова: кинетическая теория жидкостей; массоперенос в грунтовой среде; капиллярно-сорбционный потенциал; диффузионный поток.

Сезонные процессы морозного пучения оказывают существенное влияние на устойчивость зданий и сооружений, поэтому их прогнозирование является актуальной задачей.

Известно, что морозное пучение грунтов развивается в результате перемещения влаги из теплых зон грунта в холодные. Пересекая фронт промерзания, грунтовая влага замерзает и образует скопления ледяных шпиров. Особенно интенсивно пучения развиваются под сооружениями, которые способны поддерживать в грунте температуры около $-6...-0,5$ °С (например под газо- и конденсаторами [1, 2]), что связано с высокой проницаемостью грунтов при данных температурах [3].

Прогнозирование процессов перемещения поровой влаги, величины вертикальной деформации и давления морозного пучения на сегодняшний день осложняется отсутствием единой физической модели фильтрационно-диффузионных процессов в талых, промерзающих и мерзлых грунтах. Несмотря на значительное количество гипотез о природе сил, вызывающих перемещение влаги, многие из них не имеют достаточной количественной основы, позволяющей проводить расчеты [4]. В связи с этим активно развивалось феноменологическое направление, посвященное установлению количественных соотношений между эмпирическими закономерностями.

Наиболее часто в мировой гидрофизике грунтов для моделирования динамики поровой влаги применяются различные модификации уравнения Ричардса [5, 6]. И.Л. Калюжный и С.А. Лавров рекомендуют следующие уравнения для описания движения почвенной влаги [4]:

$$g_{\text{вс}}^{-\text{зр}} = -\rho_{\text{вс}}^u \frac{\lambda_w}{g} \left(\frac{\partial \psi_w}{\partial W_{\text{нз}}} \bar{\nabla} W_{\text{нз}} + \frac{\partial \psi_w}{\partial \Pi} \bar{\nabla} \Pi + g \bar{\nabla} H \right) - \rho_{\text{вс}}^u \lambda_w \bar{e}_z ; \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho_s^{zp}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\omega_s \bar{g}_{ec}^{zp}) - \nabla \cdot (\rho_{ec}^{zp} D_{ws} \bar{\nabla} \omega_s); \quad (2)$$

$$\frac{\partial \rho_w^{zp}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\omega_w \bar{g}_{ec}^{zp}), \quad (3)$$

где \bar{g}_{ec}^{zp} – вектор суммарного массового потока водно-солевого раствора через единицу поверхности грунта, кг/(м²·с); ρ_{ec}^u – истинная плотность водно-солевого раствора, кг/м³; λ_w – коэффициент влагопроводности, совпадающий с коэффициентом фильтрации, м/с; ψ_w – капиллярно-сорбционный потенциал воды, Дж/кг; W_{nz} – влажность по незамерзшей воде как отношение массы незамерзшей воды к массе твердых нерастворимых компонентов грунта, д. ед.; Π – пористость (отношение объема пор к объему твердых нерастворимых компонентов грунта), д. ед.; ρ_w^{zp} – водосодержание как отношение массы незамерзшей воды к объему грунта, кг/м³; ρ_s^{zp} – солесодержание как отношение массы растворенных солей к объему грунта, кг/м³; ω_w, ω_s – массовая доля воды и солей в незамерзшем водно-солевом растворе, д. ед.; D_{ws} – эффективный коэффициент диффузии солей в грунте, м²/с; ρ_{ec}^{zp} – растворосодержание, как отношение массы незамерзшего раствора к объему грунта, кг/м³; H – гидравлический напор, м; \bar{e}_z – единичный вектор вдоль оси z (вертикальная ось).

При отрицательных температурах формула (1) по-прежнему применима для описания потока влаги в грунте, однако частичное замерзание поровой влаги приводит к тому, что теперь капиллярно-сорбционный потенциал ψ_w является лишь только функцией температуры T , поэтому при отрицательных температурах ее можно записать в следующей форме

$$\bar{g}_w^{zp} = -\rho_{ec}^u \frac{\lambda_w}{g} \left(\frac{\partial \psi_w}{\partial T} \bar{\nabla} T + g \bar{\nabla} H \right) - \rho_{ec}^u \lambda_w \bar{e}_z, \quad (4)$$

где T – температура, К.

Уравнения (1)–(4) позволяют рассчитать плотность потока воды и солей в талых, промерзающих и мерзлых грунтах. Интегрирование уравнения (3) позволяет рассчитать массу сегрегационного льдовыделения.

Приведенные уравнения позволяют удовлетворительно описывать процессы массообмена с необходимой для инженеров точностью, однако, как будет показано ниже, они не позволяют провести четкого разделения и оценки вклада каждого механизма массопереноса в суммарный процесс переноса масс и учесть подвижность адсорбированных молекул.

Авторы статьи поставили задачу рассмотреть модель, в которой явления диффузионного массопереноса воды и солей как в талых, так и промерзающих, и мерзлых грунтах происходят при наличии градиентов содержания воды ρ_w^{zp} и соли ρ_s^{zp} в грунте, температуры T , пористости Π , давления P с учетом неодинаковой подвижности компонентов вблизи минеральной поверхности и в объемном растворе.

Известно, что в однородном по физико-механическим свойствам грунте при постоянном внешнем давлении, температуре и концентрации раствора вода перемещается из зоны с высокой влажностью в зону с низкой влажностью. Этот массоперенос обусловлен двумя основными механизмами: фильтрация и диффузия. Явление диффузии, в данной ситуации её обычно называют плёночной диффузией, происходит в плёнках водно-солевого раствора, адсорбированных на поверхности минеральных частиц грунтовой системы.

С позиций кинетической теории жидкостей, разработанной Френкелем, переход молекулы из одного положения равновесия в другое можно рассматривать как последовательность двух событий: «испарение» из первоначального положения равновесия в промежуточное с последующей «конденсацией» в новое положение равновесия. В этом случае среднюю скорость перемещения молекулы можно рассматривать как дистанцию между двумя положениями равновесия (равную длине свободного пробега в жидкости), деленную на время пребывания молекулы равновесии [7]:

$$u = \frac{\delta}{\tau} = \frac{\delta}{\tau_0} \exp\left(-\frac{E_N}{kT}\right) = \frac{\delta}{\tau_0} \exp\left(-\frac{EM}{RT}\right), \quad (5)$$

где u – средняя скорость перемещения молекулы в произвольном направлении, м/с; δ – длина свободного пробега молекулы жидкости между двумя положениями временного равновесия, м; τ – среднее время пребывания молекулы около временного положения равновесия, с; τ_0 – среднее время пребывания молекулы около временного положения равновесия при отсутствии дополнительного потенциального барьера, с; E_N – потенциальный барьер на одну частицу, Дж; E – потенциальный барьер на 1 кг вещества, Дж/кг; k – постоянная Больцмана, Дж/К; T – температура, К; M – молярная масса, кг/моль; $R = 8,31$ – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К). С учетом принципиального отличия жидкости от газа будем считать, что длина пробега δ не подчиняется закону Клаузиуса, а имеет приблизительно одну и ту же величину [7].

Получим уравнение для диффузионного потока в грунте, основываясь на теории Френкеля для i -й компоненты водно-солевого раствора. Проведем в объеме грунта три плоскости: $x = x_0$, $x = x_0 + \delta_i$, $x = x_0 - \delta_i$. Если длина свободного пробега молекулы i -й компоненты равна δ_i , тогда плоскость $x = x_0$ могут пересечь лишь те молекулы, что находятся в пределах $x = x_0 \pm \delta_i$. Так как молекулы могут двигаться в 6 различных направлениях (вперёд-назад, вверх-вниз, влево-вправо), то масса жидкости, пересекающая плоскость $x = x_0$ снизу вверх, равна

$$\Delta m_{\text{вс}} = \frac{1}{6} \left(\rho_i^u \Big|_{x_0 - \delta_i/2} \theta \right) \Delta x \Delta y \Delta z, \quad (6)$$

где $\rho_i^u \Big|_{x_0 - \delta_i/2}$ – парциальная плотность i -й компоненты водно-солевого раствора, кг/м³; θ – объемная доля воды в грунте, д. ед. Тогда плотность массового потока, проходящего через плоскость $x = x_0$ снизу вверх в единицу времени, равна

$$g_{\text{вс}} = \frac{\Delta m_{\text{вс}}}{\Delta y \Delta z \Delta t} = \frac{\rho_i^u \Big|_{x_0 - \delta_i/2} \theta}{6} \frac{\Delta x}{\Delta t}. \quad (7)$$

Но $\Delta x = \delta_i$, $\Delta t = \tau_i$, поэтому с учетом (5) имеем

$$g_{\text{вс}} = \frac{1}{6} \left(u_i \rho_i^{sp} \right) \Big|_{x_0 - \delta_i/2}, \quad (8)$$

где ρ_i^{sp} – содержание i -го компонента в единице объема грунта, кг/м³.

Аналогичную формулу имеем и для потока, идущего сверху вниз,

$$g_{\text{вн}} = \frac{1}{6} \left(u_i \rho_i^{sp} \right) \Big|_{x_0 + \delta_i/2}. \quad (9)$$

Если принять, что плотность массового потока мало меняется с расстоянием, то можем разложить её в ряд Тейлора и оставить только первые слагаемые:

$$g_{\text{вс}} = \frac{\left(u_i \rho_i^{sp} \right) \Big|_{x_0 - \delta_i/2}}{6} = \frac{1}{6} \left(u_i \rho_i^{sp} \right) \Big|_{x_0} - \frac{1}{6} \frac{\partial \left(u_i \rho_i^{sp} \right)}{\partial x} \Big|_{x_0} \frac{\delta_i}{2}; \quad (10)$$

$$g_{\text{вн}} = \frac{\left(u_i \rho_i^{sp} \right) \Big|_{x_0 + \delta_i/2}}{6} = \frac{1}{6} \left(u_i \rho_i^{sp} \right) \Big|_{x_0} + \frac{1}{6} \frac{\partial \left(u_i \rho_i^{sp} \right)}{\partial x} \Big|_{x_0} \frac{\delta_i}{2}. \quad (11)$$

Тогда, для результирующей плотности массового потока i -го компонента, в направлении оси x ,

$$g_{i,x} = g_{\text{вс}} - g_{\text{вн}} = -\frac{\delta_i}{6} \frac{\partial \left(u_i \rho_i^{sp} \right)}{\partial x}. \quad (12)$$

Обобщая уравнение (12), запишем его в векторной форме с учетом (5):

$$\bar{g}_i = -\frac{\delta_i^2}{6(\tau_0)_i} \bar{\nabla} \left(\rho_i^{sp} \exp \left(-\frac{E_i M_i}{RT} \right) \right), \quad (13)$$

где \bar{g}_i – чисто диффузионная плотность массового потока i -го компонента, как отношение массового расхода к площади поверхности грунта, кг/(с·м²).

На следующем этапе рассмотрим водно-солевой раствор в грунте в виде двух компонентов: растворенных солей и воды и присвоим соответствующую нижнюю индексацию s и w . Тогда имеем два чисто диффузионных потока:

$$\bar{g}_w = \frac{-\delta_w^2}{6(\tau_0)_w} \bar{\nabla} \left(\rho_w^{sp} e^{-\left(E_w M_w / RT \right)} \right); \quad (14)$$

$$\bar{g}_s = \frac{-\delta_s^2}{6(\tau_0)_s} \bar{\nabla} \left(\rho_s^{sp} e^{-\left(E_s M_s / RT \right)} \right). \quad (15)$$

Поскольку известно [8], что вода в грунте вблизи поверхности минеральных частиц находится в связанном состоянии, то её энергетический барьер отличается от такового для свободной воды на какую-то дополнительную величину. С позиций термодинамики энергетический барьер это дополнительная энергия, которую необходимо затратить для удаления вещества из указанного места в адсорбированной плёнке. Известно, что капиллярно-сорбционный потенциал воды $\psi_w(\rho_w^{sp}, \omega_w, \Pi)$ – это энергия, которую необходимо затратить, чтобы добавить единицу массы воды в адсорбированную плёнку, и является функцией водосодержания ρ_w^{sp} , концентрации ω_w и пористости грунта Π . Понижение химического потенциала растворителя по сравнению с чистым веществом $\mu_w^k(\omega_w)$ – это энергия, которую необходимо затратить, чтобы добавить единицу массы воды в раствор, и она является функцией концентрации. Таким образом, исходя из определения, получаем:

$$\bar{g}_w = \frac{-\delta_w^2}{6(\tau_0)_w} \bar{\nabla} \left(\rho_w^{sp} e^{-\left(E_w^0 M_w / RT \right)} e^{M_w(\psi_w + \mu_w^k) / RT} \right); \quad (16)$$

$$\bar{g}_s = \frac{-\delta_s^2}{6(\tau_0)_s} \bar{\nabla} \left(\rho_s^{sp} e^{-\left(E_s^0 M_s / RT \right)} e^{M_s(\psi_s + \mu_s^k) / RT} \right). \quad (17)$$

Следует заметить, что капиллярно-сорбционный потенциал ψ_w изменяется по толщине плёнки довольно значительно (от $-0,1$ Дж/кг в состоянии полного водонасыщения грунта до ≈ -2 МДж/кг при нулевой влажности [9]), а, следовательно, поток \bar{g}_w изменяется еще сильнее, так как ψ_w является показателем экспоненты. Это подтверждается многочисленными экспериментами, в ходе которых была установлена низкая подвижность молекул воды вблизи минеральной поверхности [8]. Следовательно, в пределах рассматриваемого поперечного сечения грунта молекулы более близко расположенные к минеральной поверхности будут диффундировать значительно медленнее, чем молекулы в свободном поровом пространстве. Чтобы учесть различие в скоростях диффузии и сохранить формализм уравнений фильтрационного типа, необходимо усреднить чисто диффузионную плотность массового потока по сечению грунта:

$$\bar{g}_w = \frac{-\delta_w^2}{6(\tau_0)_w} \bar{\nabla} \left(\frac{1}{\rho_w^{sp}} \int_0^{\rho_w^{sp}} \rho_w^{sp} e^{-\left(E_w^0 M_w / RT \right)} e^{M_w(\psi_w + \mu_w^k) / RT} d\rho_w^{sp} \right); \quad (18)$$

$$\bar{g}_s = \frac{-\delta_s^2}{6(\tau_0)_s} \bar{\nabla} \left(\frac{1}{\rho_s^{sp}} \int_0^{\rho_s^{sp}} \rho_s^{sp} e^{-\left(E_s^0 M_s / RT \right)} e^{M_s(\psi_s + \mu_s^k) / RT} d\rho_s^{sp} \right). \quad (19)$$

Для случая диффузии в свободном растворе при постоянной температуре можем получить следующие закономерности:

$$\bar{g}_w = \frac{-\delta_w^2}{6(\tau_0)_w} e^{-\left(E_w^0 M_w / RT\right)} \bar{\nabla}(\rho_w^u) = D_w \bar{\nabla}(\rho_w^u); \quad (20)$$

$$\bar{g}_s = \frac{-\delta_s^2}{6(\tau_0)_s} e^{-\left(E_s^0 M_s / RT\right)} \bar{\nabla}(\rho_s^u) = D_s \bar{\nabla}(\rho_s^u). \quad (21)$$

Интересно сравнить классические выражения для диффузионных потоков с аналогичными из кинетической теории жидкости. Величину чисто диффузионных потоков можно записать через сумму диффузионных потоков и конвективного потока, помноженного на концентрацию соответствующего компонента:

$$\bar{g}_w = \omega_w (\bar{g}_w + \bar{g}_s) + \bar{j}_w, \quad (22)$$

$$\bar{g}_s = \omega_s (\bar{g}_w + \bar{g}_s) + \bar{j}_s. \quad (23)$$

Тогда, исходя из (22) и (23), диффузионные потоки записываются следующим образом:

$$\bar{j}_w = -\bar{j}_s = \omega_s \bar{g}_w - \omega_w \bar{g}_s \quad (24)$$

Для простейшего случая диффузии в объемном растворе из (20)–(21) получаем:

$$\bar{j}_w = -\bar{j}_s = -\omega_s D_w \bar{\nabla}(\rho_w^u) + \omega_w D_s \bar{\nabla}(\rho_s^u). \quad (25)$$

В тоже время классическое выражение для диффузионного потока записывается следующим образом:

$$\bar{j}_w = -\bar{j}_s = -D_{ws} \rho_{ec}^u \bar{\nabla}(\omega_w) = -\omega_s D_{ws} \bar{\nabla}(\rho_w^u) + \omega_w D_{ws} \bar{\nabla}(\rho_s^u). \quad (26)$$

Сравнивая (25) и (26) приходим к выводу, что в соответствии с кинетической теорией жидкости классическое уравнение диффузии (26) справедливо только в частном случае $D_w = D_s$.

Из уравнений (19)–(20) становится видно, что чисто диффузионные потоки соли и воды, вообще говоря, могут быть различными. В тоже время сумма диффузионных потоков обычно принимается равной нулю [10] как в уравнении (26). Последнее допущение обуславливает неучтенную конвекцию диффузионного типа, которая представляет собой перекрестный эффект диффузии и для объемного раствора описывается следующей формулой

$$\bar{g}_{ws} = \bar{g}_w + \bar{g}_s = -D_w \bar{\nabla}(\rho_w^u) - D_s \bar{\nabla}(\rho_s^u), \quad (27)$$

где \bar{g}_{ws} – перекрестный эффект диффузии, выражающий конвективный поток всего раствора, кг/(с·м²).

Для расчета коэффициентов D_w и D_s требуется не менее 4-х измерений скорости диффузии при различных температурах. Температурная зависимость коэффициентов диффузии позволяет также рассчитать термодиффузию компонентов, которая на 1–2 порядка меньше концентрационной.

Окончательные выражения для диффузионного массопереноса компонент водно-солевого раствора в грунте с учетом выражений (20)–(21) для коэффициентов диффузии в объемном растворе записываются следующим образом:

$$\bar{g}_{dw} = -\bar{\nabla} \left(\frac{D_w(T)}{\rho_w^{2p}} \int_0^{\rho_w^{2p}} \vartheta_w^{2p} e^{M_w(\psi_w + \mu_w^k)/RT} d\vartheta_w^{2p} \right); \quad (28)$$

$$\bar{g}_{ds} = -\bar{\nabla} \left(\frac{D_s(T)}{\rho_s^{2p}} \int_0^{\rho_s^{2p}} \vartheta_s^{2p} e^{M_s(\psi_s + \mu_s^k)/RT} d\vartheta_s^{2p} \right). \quad (29)$$

Выпишем выражение для фильтрационного потока воды и соли с учетом градиента давления, исходя из выражения (4):

$$\bar{g}_{fw} = -\lambda_p \omega_w \left(\rho_w^u \frac{\partial \psi_w}{\partial \rho_w^{ep}} \bar{\nabla} \rho_w^{ep} + \rho_w^u \frac{\partial \psi_w}{\partial \Pi} \bar{\nabla} \Pi + \bar{\nabla} P \right), \quad (30)$$

$$\bar{g}_{fs} = -\lambda_p \omega_s \left(\rho_w^u \frac{\partial \psi_w}{\partial \rho_w^{ep}} \bar{\nabla} \rho_w^{ep} + \rho_w^u \frac{\partial \psi_w}{\partial \Pi} \bar{\nabla} \Pi + \bar{\nabla} P \right), \quad (31)$$

где λ_p – коэффициент влагопроводности по Колунину [11].

Для случая температуры ниже начала замерзания водно-солевого раствора необходимо положить $\bar{\nabla} \Pi = 0$, так как в этом случае растворосодержание ρ_w^{ep} , а, следовательно, и потенциал ψ_w определяются только температурой [4].

Таким образом, теперь можно записать уравнения массопереноса, в которых структурно выделены в явном виде слагаемые, связанные с массопереносом вещества за счет различных механизмов:

$$\frac{\partial \rho_w^{ep}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\bar{g}_{dw} + \bar{g}_{fw}), \quad (32)$$

$$\frac{\partial \rho_s^{ep}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\bar{g}_{ds} + \bar{g}_{fs}), \quad (33)$$

где диффузии соответствуют потоки \bar{g}_{dw} и \bar{g}_{ds} , а фильтрации соответствуют потоки \bar{g}_{fw} и \bar{g}_{fs} .

Выражения (28)–(29) показывают, что диффузионный поток соли и воды является функцией следующих величин: ρ_w^{ep} , ρ_s^{ep} , T . Таким образом, использование кинетической теории жидкости взамен феноменологических законов позволило составить математическую модель диффузии, которая позволяет описать одновременно термодиффузию и концентрационную диффузию Фика в грунтах и учесть неодинаковую подвижность молекул в адсорбированной плёнке. Выражения (30)–(31) для фильтрационного потока позволяют дополнительно учитывать конвективный массоперенос как функцию ρ_w^{ep} , Π , P .

Выводы

Используя подход, основанный на кинетической теории жидкости, построена математическая модель массопереноса в грунтовой среде, позволяющая в явном виде определить вклад различных механизмов.

На основе данного подхода получены выражения для плотности чисто диффузионного потока воды и растворенных солей с учетом неодинаковой подвижности молекул в адсорбированной плёнке (28)–(29) и позволяющие описать одновременно термодиффузию и концентрационную диффузию Фика.

Показано, что классическое выражение для плотности диффузионного потока справедливо только в частном случае равенства коэффициентов диффузии каждого компонента в соответствии с кинетической теорией жидкости (26)–(27).

Литература

1. Марков, Е.В. Расчет температурного режима многолетнемерзлых грунтов с учетом радиационного излучения в инфракрасной области спектра и термического сопротивления снежного покрова / Е.В. Марков, С.А. Пульников, А.Д. Гербер // *Фундаментальные исследования*. – 2015. – № 11 (часть 1). – С. 100–104.
2. Горковенко, А.И. Основы теории расчета пространственного положения подземного трубопровода под влиянием сезонных процессов: дис. ... д-ра. тех. наук / А.И. Горковенко. – Тюмень, 2006. – 305 с.
3. Иванов, И.А. Магистральные трубопроводы в районах глубокого сезонного промерзания пучинистых грунтов / И.А. Иванов, С.Я. Кушнир. – СПб: ООО «Недра», 2010. – 174 с.
4. Калюжный, И.Л. Гидрофизические процессы на водосборе: экспериментальные исследования и моделирование / И.Л. Калюжный, С.А. Лавров. – СПб: Нестор-История, 2012. – 616 с.

5. Михайлов, П.Ю. Динамика тепломассообменных процессов и теплосилового взаимодействия промерзающих грунтов с подземным трубопроводом: дис. ... канд. физ.-мат. наук / П.Ю. Михайлов. – Тюмень, 2012. – 175 с.

6. Физико-статистическая интерпретация параметров функции водоудерживающей способности почвы / В.В. Терлеев, W. Mirschel, В.Л. Баденко и др. // Физика, биофизика и экология почв. – 2012. – № 4(8). – С. 1–8.

7. Френкель, Я.И. Кинетическая теория жидкостей / Я.И. Френкель. – Изд-во «Наука», Ленингр. отд., Л., 1975. – 592 с.

8. Основы геокриологии. Ч. 1: Физико-химические основы геокриологии / под ред. Э.Д. Ершова. – М.: Изд-во МГУ, 1995. – 368 с.

9. Почвоведение. В 2 ч. Ч. 1: Почва и почвообразование / Г.Д. Белицина, В.Д. Васильевская, Л.А. Гришина и др. – М.: Высш. шк., 1988. – 400 с.

10. Лыков, А.В. Теория тепло- и массопереноса / А.В. Лыков, Ю.А. Михайлов. – М.–Л.: Госэнергоиздат, 1963. – 537 с.

11. Колунин, В.С. Моделирование тепломассообменных процессов в мерзлых породах с подвижной ледовой компонентой: дис. ... д-ра геол.-мин. наук. – Тюмень, 2011. – 262 с.

Поступила в редакцию 5 октября 2016 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2018, vol. 10, no. 1, pp. 37–44*

DOI: 10.14529/mmph180105

DEVELOPMENT OF MATHEMATICAL MODEL OF COMPONENT MASS TRANSFER OF WATER-SALT SOLUTION IN HEAVING SOILS BASED ON THE KINETIC THEORY OF LIQUIDS

E.V. Markov¹, S.A. Pulnikov¹, A.D. Gerber²

¹*Tyumen Industrial University, Tyumen, Russian Federation*

²*Tyumen Higher Military Engineering Command School, Tyumen, Russian Federation*

E-mail: markov.ev@mail.ru

The reliability of engineering structures mostly depends on the possibility to resist adverse environmental factors. One of the most dangerous geological processes is frost heaving of soils, which is capable to develop a huge pressure and significant irregular vertical deformations. This processes is especially dangerous for non-rigid structures with a negative average annual temperature (–6...–0,5 °C), for example, for underground gas and condensate pipelines. Pipelines has a strong bends in short sections under the influence of frost heaving pressure, that often leads to emergency incidents. To predict the frost heaving it is necessary to solve the problem of mass transfer of water-salt solution from thawed to frozen soil.

Using the kinetic theory of fluid, the authors of the article developed a mathematical model of the mass transfer of water and salt in thawed, freezing and frozen soils. The model allow to determine in an explicit form the contribution of different mechanisms of mass transfer: thermal diffusion, concentration diffusion, and filtration. The equations of diffusion transport allow to take into account the unequal mobility of molecules in an adsorbed film. In addition, it was shown that the classical expression for the diffusion flux density is valid only in the particular case of equality of the diffusion coefficients of each component in accordance with the kinetic theory of the liquid.

Keywords: kinetic theory of liquids; mass transfer; matrix potential; diffusion flow.

References

1. Markov E.V., Pul'nikov S.A., Gerber A.D. *Fundamental'nye issledovaniya*, 2015, no. 11 (part 1), pp. 100–104. (in Russ.).

2. Gorkovenko A.I. *Osnovy teorii rascheta prostranstvennogo polozheniya podzemnogo truboprovoda pod vliyaniem sezonnykh protsessov: dis. ... d-ra. tekhn. nauk* (Basics of the theory of calculating the spatial position of an underground pipeline under the influence of seasonal processes: Dr. engineering sci. diss.) / A.I. Gorkovenko, Tyumen, 2006, 305 p. (in Russ.).
3. Ivanov I.A., Kushnir S.Ya. *Magistral'nye truboprovody v rayonakh glubokogo sezonnogo promerzaniya puchinistykh gruntov* (Trunk pipelines in regions of deep seasonal freezing of the soils). SPb: Nedra Publ., 2010, 174 p. (in Russ.).
4. Kalyuzhnyy I.L., Lavrov S.A. *Gidrofizicheskie protsessy na vodosbore: Eksperimental'nye issledovaniya i modelirovaniye* (Hydrophysical processes in the catchment area: experimental research and modeling). Spb, Nestor-Istoriya Publ., 2012, 616 p. (in Russ.).
5. Mikhaylov P.Yu. *Dinamika teplomassoobmennyykh protsessov i teplosilovogo vzaimodeystviya promerzayushchikh gruntov s podzemnym truboprovodom: dis. ... kand. fiz.-mat. nauk* (Dynamics of heat and mass exchange processes and heat-force interaction of freezing soils with underground pipelines: Cand. phys. and math. sci. diss.), Tyumen, 2012, 175 p. (in Russ.).
6. Terleev V.V., Mirschel W., Badenko V.L., Guseva I.Yu., Gurin P.D. *Fizika, biofizika i ekologiya pochvy*, 2012, no. 4(8), pp. 1–8. (in Russ.).
7. Frenkel' Ya.I. *Kineticheskaya teoriya zhidkostey*. Leningrad, Nauka Publ., 1975, 592 p. (in Russ.).
8. Ershov E.D. (ed.) *Osnovy geokriologii*. Ch. 1: Fiziko-khimicheskie osnovy geokriologii. Moscow, MGU Publ., 1995, 368 p. (in Russ.).
9. Belitsina G.D., Vasil'evskaya V.D., Grishina L.A. *et al.* *Pochvovedenie*. Ucheb. dlya un-tov. Ch. 1. *Pochva i pochvoobrazovanie* (Soil science. Part 1: Soil and soil formation). Moscow, Vyssh. Shk. Publ., 1988, 400 p. (in Russ.).
10. Lykov A.V., Mikhaylov Yu.A. *Teoriya teplo- i massoperenosa* (Theory of heat and mass transfer). Moscow, Leningrad, Gosenergoizdat Publ., 1963, 537 p. (in Russ.).
11. Kolunin V.S. *Modelirovaniye teplomassoobmennyykh protsessov v merzlykh porodakh s podvizhnoy ledovoy komponentoy: dis. ... d-ra. geol.-min. nauk* (Modeling of heat and mass transfer processes in frozen rocks with a mobile ice component: Dr. geological and mineralogical sci. diss.). Tyumen, 2011, 262 p. (in Russ.).

Received October 5, 2016

РАСЧЕТНО-ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ЧАСТОТ И ФОРМ СОБСТВЕННЫХ КОЛЕБАНИЙ СВАРНОГО КОРПУСА КОРИОЛИСОВОГО РАСХОДОМЕРА

А.А. Яушев¹, П.А. Тараненко¹, А.В. Жестков², В.А. Логиновский³

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

² ООО «ЭлМетро-Инжиниринг», г. Челябинск, Российская Федерация

³ ООО «НТЦ МЭЛИС», г. Челябинск, Российская Федерация

E-mail: iaushevaa@susu.ru

Статья посвящена расчетному и экспериментальному определению частот и форм собственных колебаний сварного корпуса кориолисового расходомера. Кориолисов расходомер предназначен для измерения массового расхода жидкостей и газов. Корпус расходомера сварен из тонкостенных стальных пластин 12Х18Н10Т. Формы и частоты собственных колебаний корпуса определены расчетом с помощью метода конечных элементов и экспериментально с использованием технологии экспериментального модального анализа. При экспериментальном определении модальных характеристик свободно ввешенного корпуса колебания возбуждали с использованием ударного молотка и модального вибростенда.

Для оценки близости расчетных и экспериментальных форм использован критерий модальной достоверности (Modal Assurance Criterion) МАС. Показано, что отличие частот и форм собственных колебаний корпуса между расчетом и экспериментом превышает 30 %, а отличие между частотами и формами собственных колебаний отдельных элементов корпуса, не содержащих сварных соединений, не превышает 3 %. Тогда наиболее вероятной причиной расхождения расчетных и экспериментальных частот и форм собственных колебаний корпуса являются сварные соединения, не учитываемые в его конечноэлементной модели.

Выдвинуто предположение о том, что столь существенное различие можно объяснить возникающими после сварки остаточными напряжениями. Для проверки этой гипотезы выполнен отпуск сваренного корпуса. Установлено, что после отпуска отличие между расчетными и экспериментальными формами и частотами собственных колебаний корпуса снизилось до 6 %. Полученный результат позволил объяснить причину расхождения расчетных и экспериментальных частот и форм собственных колебаний корпуса расходомера.

Ключевые слова: кориолисов расходомер; метод конечных элементов; собственная частота; собственная форма; экспериментальный модальный анализ; критерий модальной достоверности МАС; остаточные напряжения.

Введение

Кориолисов расходомер предназначен для измерения массового расхода жидкостей и газов. Он состоит из корпуса и двух расположенных в нем U-образных колеблющихся трубок, по которым движется измеряемая среда. Обзор конструкций кориолисовых расходомеров приведен в [1, 2], а подробное описание принципа их работы в [3].

При исследовании динамических характеристик расходомера в статье [4] установлено, что формы и частоты собственных колебаний трубок, полученные методом конечных элементов и экспериментально, практически совпадают. Формы колебаний корпуса в статье [4] не рассматривались. Дальнейшие исследования показали, что в отличие от трубок частоты и формы собственных колебаний корпуса, полученные расчетом и экспериментально, различаются более чем на 30 %. Поиску причин расхождения между расчетными и экспериментальными частотами и формами собственных колебаний сварного корпуса кориолисового расходомера и посвящена данная статья.

Расчетное и экспериментальное определение частот и форм собственных колебаний корпуса

Корпус расходомера изготовлен из листов стали 12Х18Н10Т толщиной 2 мм. Схема корпуса приведена на рис. 1. Он состоит из массивного основания, двух пластин и бортиков. Для увеличения жесткости конструкции между передней и задней пластинами установлены две втулки. Пластина имеет два отверстия для установки втулок и расположенное в центре штампованное углубление глубиной 5 мм. Все элементы корпуса сварены в защитном газе неплавящимся электродом.

С целью упрощения в расчетной модели и экспериментах используется корпус расходомера без трубок. Для расчетного определения частот и форм собственных колебаний корпуса сформирована его конечно-элементная модель. Результаты расчета обсуждаются ниже и приведены в таблице. С целью оценки корректности результатов расчета частоты и формы собственных колебаний корпуса определены экспериментально. Методика верификации конечно-элементной модели по результатам модальных испытаний приведена в статьях [5, 6]. При экспериментальном определении модальных характеристик корпуса колебания в нем возбуждали с использованием ударного молотка и модального вибростенда. Особенности модальных испытаний, преимущества и недостатки различных видов возбуждения представлены в [7, 8]. В эксперименте корпус свободно вывешивали на податливых тросах, не оказывающих влияния на собственные частоты и формы в исследуемом частотном диапазоне.

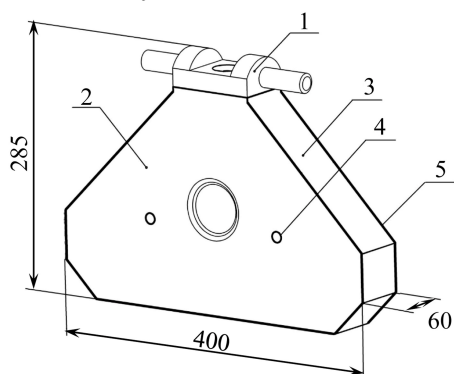


Рис. 1. Схема корпуса: 1 – основание; 2 – пластина; 3 – бортик; 4 – втулка; 5 – сварные швы

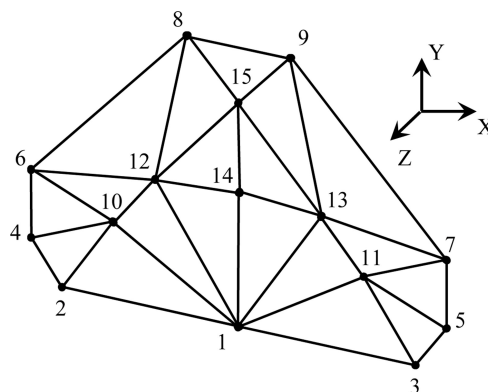


Рис. 2. Экспериментальная модель корпуса (расположение измерительных точек)

Испытания выполнены с использованием комплекса, в состав которого входят:

- 40 каналная измерительная система LMS SCADAS Recorder для сбора и обработки сигналов;
- пакет LMS Test.Lab для проведения модальных испытаний и последующей идентификации собственных частот и форм;
- ударный молоток PCB 086C03 со встроенным датчиком силы;
- трехкомпонентные пьезоакселерометры PCB 356A32 чувствительностью 100 mV/g;
- модальный вибростенд TMS2100E11;
- датчик силы PCB 208C03.

Испытания с ударным молотком и модальным вибростендом проведены в частотном диапазоне от 0 до 800 Гц, охватывающем первые шесть частот собственных колебаний корпуса. С помощью геометрического модуля программы LMS Test.Lab построена модель передней пластины корпуса, приведенная на рис. 2. Узлы модели соответствуют координатам точек, в которых располагались акселерометры и производились измерения отклика.

При возбуждении колебаний с использованием молотка в выбранную точку конструкции наносили последовательно несколько ударов. По результатам каждого удара регистрировали входной ударный импульс и отклики по виброускорениям во всех измерительных точках конструкции и получали частотные передаточные функции. Далее эксперимент повторялся при возбуждении в другой точке. По полученным осредненным частотным передаточным функциям с помощью алгоритма PolyMax [9–11] идентифицировали частоты и формы собственных колебаний корпуса.

При использовании модального вибростенда (рис. 3) вынуждающее воздействие прикладывалось в точке 13.



Рис. 3. Экспериментальное определение частот и форм собственных колебаний корпуса

Максимальная разница между первыми шестью собственными частотами, найденными с использованием модального молотка и модального вибростенда, не превысила 2 %.

Для оценки близости расчетных и экспериментальных форм использован критерий модальной достоверности (*Modal Assurance Criterion*) MAC [9, 12]. MAC – критерий соответствия между двумя векторами форм $\{u\}_p$ (расчет) и $\{u\}_э$ (эксперимент), он определяется следующим образом

$$MAC_{ij} = \frac{|\{u\}_{pi}^T \{u\}_{эj}|^2}{(\{u\}_{эi}^T \{u\}_{эj})(\{u\}_{pi}^T \{u\}_{pj})},$$

где i, j – номера собственных форм.

Если векторы $\{u\}_э$ и $\{u\}_p$ являются оценками одной и той же формы колебаний, то критерий модальной достоверности стремится к 1, если же векторы являются оценками двух различных форм колебаний, то значение критерия должно быть близкой к нулю величиной вследствие ортогональности собственных форм.

Разница между расчетной (f_p) и экспериментальной ($f_э$) частотой собственных колебаний определяется следующим образом

$$\delta = \frac{f_p - f_э}{f_э} \cdot 100 \%$$

Сравнение экспериментальных частот и форм собственных колебаний корпуса с расчетными

Расчет		До термообработки				После термообработки			
i	f_{pi} , Гц	j	$f_{эj}^{до}$, Гц	$\delta_{ij}^{до}$, %	$MAC_{ij}^{до}$	j	$f_{эj}^{после}$, Гц	$\delta_{ij}^{после}$, %	$MAC_{ij}^{после}$
1	354,7	1	236,1	33,4	0,51	1	333,7	5,9	0,89
2	435,5	2	283,6	34,9	0,83	2	427,4	1,9	0,92
3	459,6	3	296,6	35,5	0,79	3	406,1	11,6	0,91
4	601,3	–	–	–	–	5	593,8	1,2	0,44
5	628,9	4	426,4	32,2	0,4	4	571,4	9,1	0,43
6	736,2	5	458,8	37,7	0,42	6	700,6	4,8	0,8

Установлено, что частоты и формы собственных колебаний корпуса, полученные расчетом и экспериментально, различаются более чем на 30 % (см. таблицу). В таблице индексом i обозначены расчетные собственные формы, а индексом j – экспериментальные.

Для объяснения причин расхождения результатов расчета и эксперимента исследованы собственные частоты и формы отдельных элементов корпуса. Так, первые шесть частот и форм собственных колебаний передней пластины корпуса (позиция 2 рис. 1), полученные МКЭ и экспериментально, различаются менее чем на 3 %. Из совпадения форм и частот собственных колебаний пластины можно сделать вывод, что геометрия модели и свойства материала (плотность и модуль упругости) в расчетной модели соответствуют реальной конструкции.

Тогда наиболее вероятной причиной расхождения расчетных и экспериментальных частот и форм собственных колебаний корпуса являются не учитываемые в его конечноэлементной модели сварные соединения.

После сварки в конструкции могут возникать остаточные напряжения. Для оценки их влияния на частоты и формы собственных колебаний корпуса выполнен его отпуск по следующей программе: выдержка корпуса в печи при температуре 850 °С в течение часа, далее охлаждение до нормальной температуры за пять часов.

После отпуска и, соответственно, снятия остаточных напряжений в корпусе отличие первых 6 расчетных собственных частот корпуса от экспериментальных уменьшилось с 30 % до 6 %. До термообработки корпуса в эксперименте не удалось идентифицировать форму собственных колебаний, соответствующую четвертой расчетной форме. Идентифицировать эту форму удалось после отпуска. Сравнение расчетных и экспериментальных форм и частот собственных колебаний до и после отпуска приведено на рис. 4 и в таблице. Представленные результаты эксперимента получены с использованием модального вибростенда.

Известны работы, посвященные аналогичным исследованиям. Например, в работе [13] рассмотрено влияние сжимающих напряжений на собственные частоты пластин и оболочек. В работах [14, 15] исследуется влияние остаточных напряжений на резонансную частоту мембран датчиков.

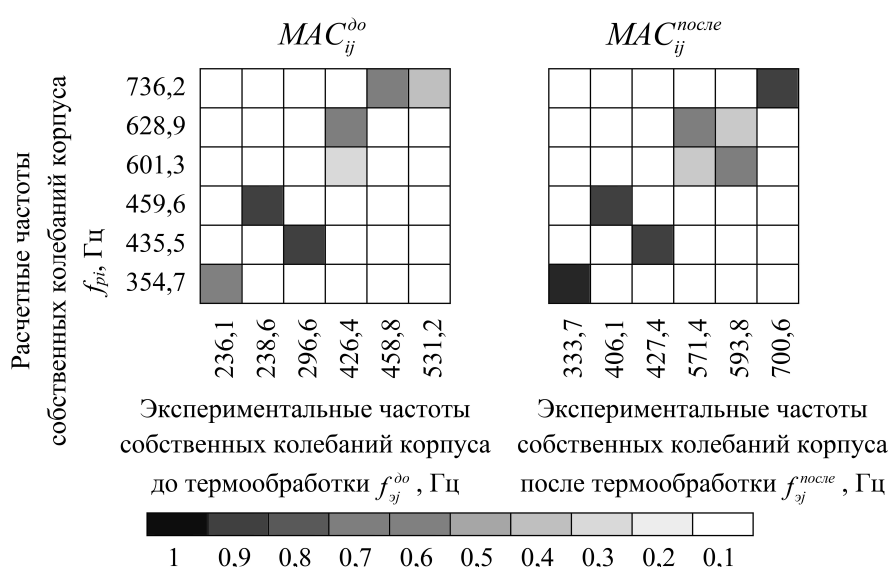


Рис. 4. Сравнение по MAC критерию расчетных и экспериментальных форм собственных колебаний корпуса (для случая возбуждения колебаний модальным вибростендом)

Для оценки уровня напряжений в сварном корпусе выполнен следующий эксперимент. На пластину (позиция 2, рис. 1) в районе 15 точки (рис. 2) до сварки корпуса приклеена трехкомпонентная розетка с взаимным расположением осей тензорезисторов под углом 45°. Измерен начальный уровень сигнала с тензорезисторов. Далее выполнена сварка корпуса и повторно измерен сигнал с тензорезисторов. По сопоставлению сигналов, измеренных до и после сварки, определено сжимающее эквивалентное напряжение, возникающее после сварки в точке 15. Оно составило 100 МПа.

На этапе выбора точки для наклейки тензорезисторов не были известны ни величина, ни место расположения возникающих в корпусе после его сварки остаточных напряжений. Для наклейки тензорезисторов выбрана точка 15, поскольку ей соответствует максимальное смещение на четвертой форме собственных колебаний, найденной расчетным путем. Соответствующую ей экспериментальную форму (до отпуска) идентифицировать не удалось. Расчетные перемещения и деформации, соответствующие четвертой собственной форме и найденные на модели, не учитывающей остаточных напряжений, приведены на рис. 5. Максимальные локальные деформации на этой форме возникают в районе установки втулок, а деформации в исследуемой 15 точке составляют примерно 0,15 от максимальных. Расположить тензорезисторы выше, в зоне с более высоким уровнем деформаций, не удалось из-за близкого расположения сварного шва.

Реальное распределение остаточных деформаций в корпусе после сварки может не совпадать с расчетными деформациями, приведенными на рис. 5.

На рис. 6 приведены две амплитудно-частотные характеристики, снятые при возбуждении колебаний вибростендом в одной точке корпуса до и после его термообработки. По вертикальной

оси отложено отношение амплитуды ускорения акселерометра на корпусе к амплитуде сигнала с датчика силы (g/H). Из сравнения графиков видно, что термообработка привела к повышению частот собственных колебаний корпуса.

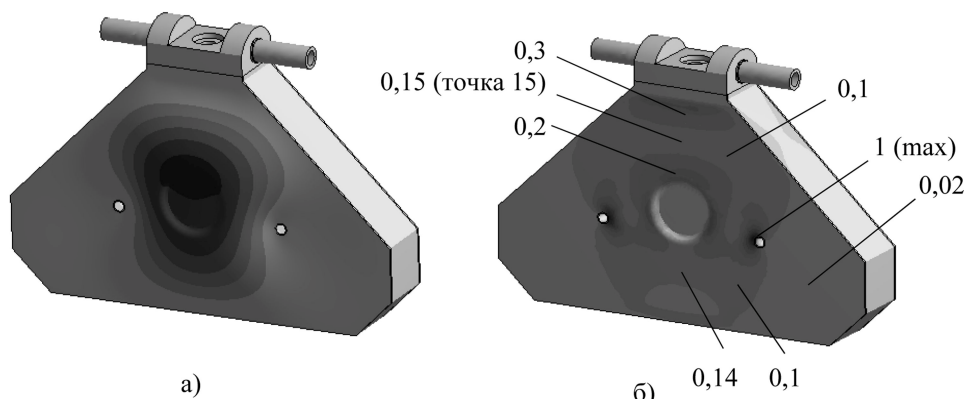


Рис. 5. Расчетные перемещения (а) и деформации (б) на четвертой собственной форме, найденные на модели, не учитывающей остаточных напряжений

Таким образом, основной причиной расхождения собственных частот в расчете и эксперименте являются не учитываемые в конечноэлементной модели остаточные напряжения, возникающие после сварки корпуса.

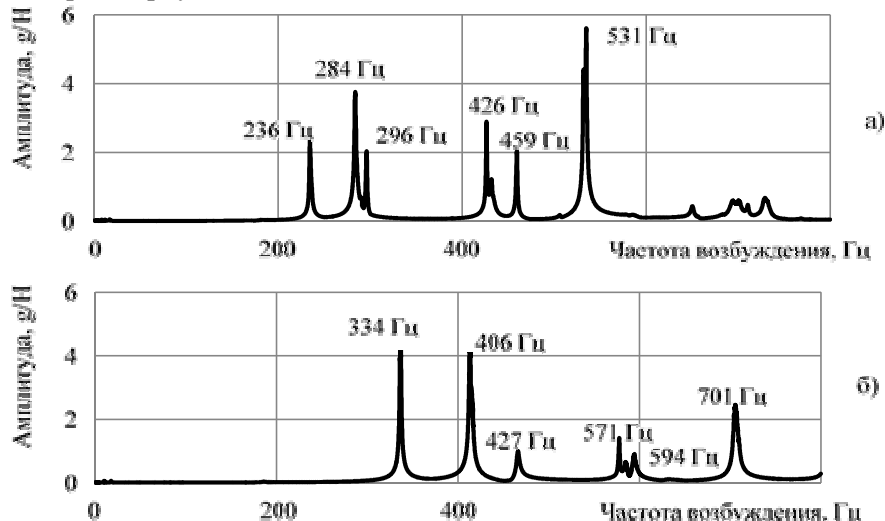


Рис. 6. Относительная АЧХ 12 точки корпуса по оси Z до термообработки (а) и после термообработки (б)

Закключение

В статье расчетным и экспериментальным путем найдена и подтверждена основная причина расхождения расчетных и экспериментальных форм и частот собственных колебаний тонкостенного сварного корпуса кориолисового расходомера. Установлено, что снижение экспериментальных частот собственных колебаний корпуса на 30 % и соответствующее изменение его собственных форм обусловлено остаточными напряжениями в корпусе, возникающими после его сварки.

Испытания проведены с использованием оборудования ЦКП «Экспериментальная механика» ЮУрГУ.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России. Соглашение о предоставлении субсидии № 14.578.21.0191 от 03.10.2016. Уникальный идентификатор соглашения RFMEFI57816X0191.

Литература

1. Wang, T. Coriolis flowmeters: a review of developments over the past 20 years, and an assessment of the state of the art and likely future directions / R. Baker, T. Wang // Flow Measurement and Instrumentation. – 2014. – Vol. 40. – P. 99–123.
2. Plache, K.O. Measuring mass flow using the Coriolis principle / K.O. Plache, R. Loxton, P. Pope. – Springer, Boston, MA, 1990. – P. 55–62.

3. Raszillier, H. Coriolis-effect in mass flow metering / H. Raszillier, F. Durst // *Archive of Applied Mechanics*. – 1991. – Vol. 61, № 3. – P. 192–214.
4. Yaushev, A.A. Study of the Oscillation Modes of a Coriolis Flowmeter Using a Parametric Finite Element Model, Verified by the Results of Modal Testing / A.A. Yaushev, P.A. Taranenko, V.A. Loginovskiy // *International Conference on Industrial Engineering, Procedia Engineering*. – 2016. – Vol. 150. – P. 336–340.
5. Melcer, J. Experimental Verification of a Computing Model / J. Melcer // *Applied Mechanics & Materials*. – 2014. – Vol. 732. – P. 345–348.
6. Межин, В.С. Практика применения модальных испытаний для целей верификации конечно-элементных моделей конструкции изделий ракетно-космической техники / В.С. Межин, В.В. Обухов // *Космическая техника и технология*. – 2014. – № 1(4). – С. 86–91.
7. Дэссинг, О. Испытания конструкций / О. Дэссинг. – М.: Брюль и Кьер, 1989. – 118 с.
8. Ewins, D.J. Modal Testing: Theory, Practice and Application / D.J. Ewins // *Hertfordshire: Research Studies Press*. – 2000. – 562 p.
9. Хейлен, В. Модальный анализ: теория и испытания / В. Хейлен, С. Ламменс, П. Сас. – М.: ООО «Новатест», 2010. – 319 с.
10. The PolyMAX frequency-domain method: a new standard for modal parameter estimation / B. Peeters, H. Auweraer, P. Guillaume, J. Leuridan // *Shock and Vibration*. – 2004. – Vol. 11. – P. 395–409.
11. Peeters B. Automotive and aerospace applications of the PolyMAX modal parameter estimation method / B. Peeters, P. Guillaume *et al.* // *Proceeding of IMAC*. – 2004. – Vol. 22. – P. 26–29.
12. Allemang, R.J. The Modal Assurance Criterion – Twenty Years of Use and Abuse / R.J. Allemang // *University of Cincinnati, Sound and Vibration*. – 2003. – P. 14–21.
13. Ельмуратов, С.К. Расчет гибких оболочек и пластин на устойчивость и колебания / С.К. Ельмуратов // *Наука и техника Казахстана*. – 2013. – № 1–2. – С. 26–29.
14. Stress Influences on the Ultrasonic Transducers / S. Lee, T. Tanaka, K. Inoue, J.-M. Kim *et al.* // *Sensors and Actuators A: Physical*. – 2005. – Vol. 119, Issue 2. – P. 405–411.
15. Methods of measuring residual stresses in components / N.S. Rossini, M. Dassisti, K.Y. Benyounis, A.G. Olabib // *Materials and Design*. – 2012. – Vol. 35. – pp. 572–588.

Поступила в редакцию 18 марта 2016 г.

*Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2018, vol. 10, no. 1, pp. 45–51*

DOI: 10.14529/mmph180106

COMPUTATIONAL AND EXPERIMENTAL STUDY OF FREQUENCIES AND NATURAL MODE OF WELDED SHELL OF CORIOLIS FLOWMETER

A.A. Yaushev¹, P.A. Taranenko¹, A.V. Zhestkov², V.A. Loginovskiy³

¹ *South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation*

² *EIMetro-Engineering LLC, Chelyabinsk, Russian Federation*

³ *MELIS LLC, Chelyabinsk, Russian Federation*

E-mail: iaushevaa@susu.ru

The article is dedicated to computational and experimental determination of frequencies and natural modes of welded shell of Coriolis flowmeter. Coriolis flowmeter is intended for measuring mass flow of fluids and gases. A shell of Coriolis flowmeter is welded out of 12X18H10T thin steel plates. Forms and natural oscillation modes of the shell are determined by calculation using the finite elements method and experimentally, using the technique of experimental modal analysis. During the experimental determination of modal characteristics of a freely hanging shell, oscillations were excited with the use of an impact hammer and a modal oscillation table.

In order to evaluate precision of computational and experimental forms, Modal Assurance Criterion (MAC) is used. It is shown that the difference of frequencies and natural modes of the shell between calculation and experiment exceeds 30 %, and the difference between frequencies and natural modes of separate elements of the shell which do not contain welded joints does not exceed 3 %. Therefore, the most probable cause of differences of computational and experimental frequencies and natural modes of the shell are welded joints which are not considered in its finite element model.

An assumption that such significant difference can be explained by the occurring after welding residual stress is made. In order to test this hypothesis, a tempering of the welded shell is carried out. It is determined that after the tempering the difference between computational and experimental forms and frequencies of natural modes of the shell decreased to 6 %. The obtained result allowed explaining the cause of inconsistency of computational and experimental frequencies and forms of natural modes of the flowmeter's shell.

Keywords: Coriolis flowmeter; finite elements method; natural frequency; natural mode; experimental modal analysis; modal assurance criterion (MAC); residual stress.

References

1. Wang T., Baker R. Coriolis flowmeters: a review of developments over the past 20 years, and an assessment of the state of the art and likely future directions. *Flow Measurement and Instrumentation*, 2014, Vol. 40, pp. 99–123. DOI: 10.1016/j.flowmeasinst.2014.08.015
2. Plache K.O., Loxton R., Pope P. *Measuring mass flow using the Coriolis principle*. Springer, Boston, MA, 1990, pp. 55–62.
3. Raszillier H., Durst F. Coriolis-effect in mass flow metering. *Archive of Applied Mechanics*, 1991, Vol. 61, no. 3, pp. 192–214.
4. Yaushev A.A., Taranenko P.A., Loginovskiy V.A. Study of the Oscillation Modes of a Coriolis Flowmeter Using a Parametric Finite Element Model, Verified by the Results of Modal Testing. International Conference on Industrial Engineering, *Procedia Engineering*, 2016, Vol. 150, pp. 336–340. DOI: 10.1016/j.proeng.2016.07.027
5. Melcer J. Experimental Verification of a Computing Model. *Applied Mechanics & Materials*, 2014, Vol. 732, pp. 345–348. DOI: 10.4028/www.scientific.net/AMM.732.345
6. Mezhin V.S., Obukhov V.V. The practice of using modal tests to verify finite element models of rocket and space hardware. *Kosmicheskaya tekhnika i tekhnologiya* (Space technics and technology), 2014, no. 1(4), pp. 86–91. (in Russ.).
7. Dossing O. *Structural Testing, Mechanical Mobility Measurements*. Brüel & Kjær. Denmark, 1989, 101 p.
8. Ewins D.J. *Modal Testing: Theory, Practice and Application*, Hertfordshire: Research Studies Press, 2000, 562 p.
9. Heylen W., Lammens S., Sas P. *Modal Analysis Theory and Testing*. Katholieke Universiteit Leuven, 1997, 340 p.
10. Peeters B., Auweraer H., Guillaume P., Leuridan J. The PolyMAX frequency-domain method: a new standard for modal parameter estimation. *Shock and Vibration*, 2004, Vol. 11, Issue 3-4, pp. 395–409. DOI: 10.1155/2004/523692
11. Peeters B., Guillaume P. *et al.* Automotive and aerospace applications of the PolyMAX modal parameter estimation method. *Proceeding of IMAC*, 2004, Vol. 22, pp. 26–29.
12. Allemang R.J. *The Modal Assurance Criterion – Twenty Years of Use and Abuse*. University of Cincinnati, Sound and Vibration, 2003, pp. 14–21.
13. Elmuratov S.K. Calculation of flexible covers and plates on stability and fluctuations. *Science and Technology of Kazakhstan*, 2013, Vol. 1-2, pp. 26–29.
14. Lee S., Tanaka T., Inoue K., Kim J.-M., Shin Y.-E., Okuyama M. Stress Influences on the Ultrasonic Transducers. *Sensors and Actuators A: Physical*, 2005. Vol. 119, Issue 2, pp. 405–411. DOI: 10.1016/j.sna.2004.10.026
15. Rossini N.S., Dassisti M., Benyounis K.Y., Olabib A.G. Methods of measuring residual stresses in components. *Materials and Design*, 2012. Vol. 35, pp. 572–588.

Received March 18, 2016

ВЫБОР ПАРАМЕТРОВ ЦИФРОВЫХ ФИЛЬТРОВ ПРИ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

А.Н. Бехтерев, А.Ю. Леднов, Н.А. Савинова

*Магнитогорский государственный технический университет
им. Г.И. Носова, г. Магнитогорск, Российская Федерация
E-mail: lednov@mail.ru*

В различных областях знаний при исследовании изменяющихся процессов, по отклику, получаемому с помощью физического прибора, анализируемый сигнал условно можно разделить на две компоненты: «полезный» сигнал и сигнал «помех». В частности при решении задач качественного и количественного спектрофотометрического анализа возникают проблемы искажения полос поглощения помехами различной природы: наличием некомпенсированных спектров поглощения атмосферы, влиянием спектров адсорбированных на поверхности образца молекул, наличием интерференционных помех в тонких или многослойных объектах.

Проведен сравнительный анализ влияния фильтрации модельного спектра поглощения медианным фильтром и фильтрами Савицкого–Голая нулевого–первого (SG0), второго–третьего (SG2), четвертого–пятого (SG4) порядков. Модельный спектр описывался контурами поглощения гауссовской и лоренцевской формы. По результатам численного эксперимента приведены рекомендации по оптимальной фильтрации экспериментальных спектров поглощения конденсированных сред с целью их последующего анализа и обработки:

– для полного подавления полос поглощения «помех» предпочтительно применение медианного фильтра, при этом для гауссовского контура ширина окна фильтра должна быть в 5 раз больше полной ширины на половине высоты подавляемой полосы поглощения, а для контура лоренцевской формы это соотношение должно быть более 20.

– изменение относительной интенсивности полосы поглощения «полезного» сигнала менее чем на 1 % реализуется при определенной относительной ширине окна. В случае гауссовской полосы поглощения относительная ширина окна для медианного фильтра должна составлять не более 0,2, для фильтров SG0 – 0,2, SG2 – 0,9, SG4 – 1,6. Для контура лоренцевской формы это соотношение должно быть для медианного фильтра не более 0,2, для фильтров SG0 – 0,2, SG2 – 0,7, SG4 – 1,1.

Ключевые слова: цифровая фильтрация; форма линии поглощения; обработка сигналов; спектрофотометрия; спектроскопия.

Введение

В различных областях знаний при исследовании изменяющихся процессов, по отклику, получаемому с помощью физического прибора, анализируемый сигнал условно можно разделить на две компоненты: «полезный» сигнал и сигнал «помех». Так, например, в спектроскопии выделяют линии поглощения и сигнал, обусловленный шумом различной природы [1–4]. А в инженерных исследованиях при изучении влияния размерных факторов, связанных с неровностью поверхности системы, на адгезию, смачиваемость, трение и т. п., рельеф поверхности разделяют на шероховатость, волнистость и отклонение формы от базовой линии. Отмеченные факторы в конкретных исследованиях можно считать «полезным» сигналом или сигналом «помех» и при этом возникает проблема подавления «помех». Данная проблема решается с помощью разнообразных физических и цифровых фильтров [5].

В процессе решения задач качественного и количественного спектрофотометрического анализа спектрофотометрическую информацию можно разделить на «полезный» сигнал и «помехи».

Перед обработкой спектров поглощения наноструктур (назовем эти спектры «полезным» сигналом), например, в ИК-спектрах конденсированных сред, появляется необходимость предварительной фильтрации исходного спектра от «помех». Эти «помехи» могут быть вызваны факторами различной природы. Например, наличием нескомпенсированных спектров поглощения атмосферы, влиянием спектров адсорбированных на поверхности образца молекул, наличием интерференционных помех в тонких или многослойных объектах. Искажение формы и параметров полос поглощения может также существенно повлиять на погрешности последующей обработки спектров, например, для расчетов оптических характеристик сред по формулам Френеля, Крамера–Кронига, классического дисперсионного анализа. Сложность фильтрации «полезного» сигнала от «помехи» заключается в том, что они могут обладать схожими контурами полос поглощения. Наиболее часто для описания контуров полос используют контуры лоренцевской и гауссовской формы. Для спектральной линии, описываемой данными контурами, основными являются следующие параметры: положение полосы поглощения, интенсивность и полуширина (FWHM). Особый интерес в связи с поставленными задачами качественного и количественного спектрофотометрического анализа представляет влияние на параметры спектра вида фильтра и его характеристик. Существует множество способов фильтрации спектров [4]. В рамках данной работы авторы сравнили влияния наиболее часто используемых при спектрофотометрических исследованиях медианного фильтра и оконных фильтров Савицкого–Голая [4–8] нулевого–первого, второго–третьего, четвертого–пятого порядков [4, 9] на параметры полос поглощения, описываемых контурами лоренцевской и гауссовской формы. Задача решалась методами математического моделирования.

Моделирование контура одиночной полосы поглощения и конструирование фильтров

Полоса поглощения, описываемая контуром Гаусса, моделировалась с помощью выражения:

$$T(\nu) = 1 - h_0 \exp \left[-4 \cdot \ln 2 \cdot \frac{(\nu - \nu_0)^2}{FWHM_0^2} \right], \quad (1)$$

контур полосы поглощения лоренцевской формы аппроксимировался формулой:

$$T(\nu) = 1 - h_0 \frac{FWHM_0^2}{FWHM_0^2 + 4(\nu - \nu_0)^2}, \quad (2)$$

где h_0 – интенсивность максимума (отн. ед.), ν – волновое число (см^{-1}), ν_0 – волновое число, соответствующее максимуму поглощения (см^{-1}), $FWHM_0$ – полуширина полосы поглощения (см^{-1}).

Модели контуров полос поглощения (1) и (2) использовались в качестве входных данных для оконных фильтров. Эти модели дискретизировались с частотой дискретизации $d\nu$, при этом соблюдалось соотношение: $d\nu \ll FWHM_0$. Результатом дискретизации была функция T_i , где $i \in (0; N)$.

Результат фильтрации спектра для фильтра Савицкого–Голая вычислялся как:

$$Y_i = \sum_{k=-M}^M C_k T_{i+k},$$

где T – входная функция поглощения, Y – фильтрованная функция, C – весовые коэффициенты оконного фильтра, M – параметр фильтра, характеризующий количество точек, используемых для фильтрации, количество которых считалось как $2M + 1$.

Для фильтра нулевого–первого порядка коэффициенты оконного фильтра Савицкого–Голая (SG0) рассчитывались по формулам [4, 6, 8]:

$$C_k = 1/(2M + 1),$$

для фильтра второго–третьего порядка (SG2):

$$C_k = \frac{3(3M^2 + 3M - 1 - 5k^2)}{(2M + 3)(2M + 1)(2M - 1)},$$

для четвертого–пятого порядка (SG4):

$$C_k = \frac{15 \cdot 63k^2 - 35(2M^2 + 2M - 3)k^2 + 15M^4 + 30M^3 - 35M^2 - 50M + 12}{4(2M + 5)(2M + 3)(2M + 1)(2M - 1)(2M - 3)},$$

медианный фильтр (Median) реализовывался в соответствии с [9]:

$$Y_i = \text{med}(T_k), \quad k \in (i - M; i + M),$$

ширину окон фильтров рассчитывали как:

$$WW = dv \cdot 2M.$$

Обсуждение результатов моделирования

Основные результаты моделирования влияния фильтрации на параметры модельной полосы поглощения представлены на рис. 1–4. Согласно рис. 1 все оконные фильтры, рассмотренные в данном исследовании, не изменяли положения максимума полосы поглощения ν_0 , что является важным результатом, позволяющим использовать данный параметр для последующей идентификации спектра.

Для исследования влияния ширины окна фильтра на изменение интенсивности и формы контура был проведен численный эксперимент. На рис. 1 приведены основные результаты по изучению искажения интенсивности гауссовского контура поглощения в зависимости от относительной ширины окна $WW / FWHM = 4,75$. Сплошной линией изображен контур полосы поглощения до фильтрации, точечной линией – контур после фильтрации. Из полученных данных следует, что медианный фильтр практически не искажает контур полосы поглощения, однако происходит обрезание интенсивности контура. Фильтр Савицкого–Голая SG0 – значительно уширяет полосу поглощения, существенно уменьшая ее интенсивность; фильтр SG2 – при данном соотношении $WW / FWHM$ несколько искажает форму полосы поглощения, появляются дополнительные боковые полосы, меньше искажается полуширина максимума и его высота; фильтр SG4 в данном случае вносит наименьшие искажения, однако при увеличении ширины окна появляются иска-

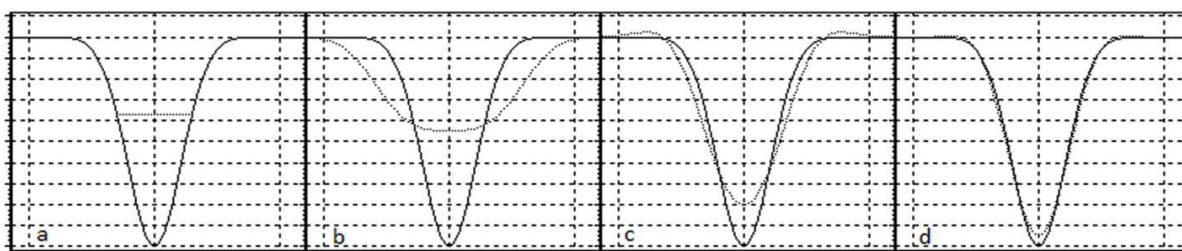


Рис. 1. Характер искажения полосы поглощения гауссовской формы различными фильтрами: а) Median; б) SG0; в) SG2; д) SG4

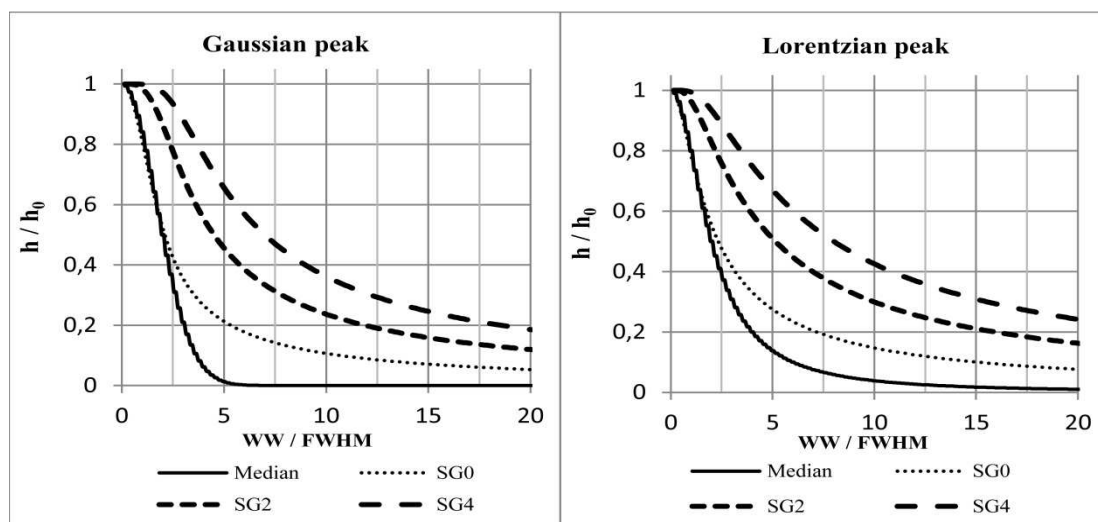


Рис. 2. Изменение относительной высоты максимума в зависимости от относительной ширины окна фильтров жения, аналогичные фильтру SG2. Общий характер искажения формы лоренцевской полосы поглощения аналогичен рассмотренным результатам для полосы поглощения гауссовской формы.

Для обобщения результатов исследования они представлены в безразмерных величинах. На рис. 2 приведена зависимость отношения интенсивности полосы поглощения после фильтрации h к начальной интенсивности полосы h_0 в зависимости от относительной ширины окна (отношения ширины окна WW к параметру полосы поглощения $FWHM$). Полученные результаты позволяют сделать вывод, что искажение интенсивности полосы гауссовской формы при малых значениях параметра $WW / FWHM$ меньше, чем для полосы лоренцевской формы. Однако при увеличении этого параметра (абсцисса на графике) уменьшение значения интенсивности полосы лоренцевской формы становится меньше, чем для гауссовской формы. Контур гауссовской полосы поглощения при $WW / FWHM > 5$ и лоренцевской полосы при $WW / FWHM > 20$ практически полностью подавляется медианным фильтром.

Для более детального изучения искажений контура полос поглощения были построены зависимости, изображенные на рис. 3 и рис. 4. Из полученных результатов следует, что для контура гауссовской формы и искажении начальной интенсивности менее чем на 1 % при использовании медианного и SG0 фильтров, соотношение $WW / FWHM$ должно быть не более 0,2, фильтра SG2 – не более 0,9, фильтра SG4 – не более 1,6. Для контура лоренцевской формы и искажении начальной интенсивности полосы менее чем на 1 % в случае применения медианного фильтра и фильтра SG0 соотношение $WW / FWHM$ должно быть менее 0,2, в случае фильтра SG2 – менее 0,7, фильтра SG4 – менее 1,1.

На рис. 4 приведены результаты исследования зависимости относительной полуширины (отношения $FWHM$ после фильтрации к начальному параметру $FWHM_0$) от относительной ширины окна фильтров. Для обеспечения 1 % точности воспроизведения полуширины (см. рис. 4), относительная ширина окна фильтра должна удовлетворять таким же критериям, что и для искажения интенсивности полосы поглощения. Сравнивая результаты использования SG0 и медианного фильтров, можно прийти к выводу, что медианный фильтр искажает полуширину максимума меньше, чем фильтр SG0. При малых значениях относительной ширины окна влияние фильтра SG0 на интенсивность и полуширину полосы поглощения больше, чем у медианного фильтра, а фильтры SG2 и SG4 наиболее точно описывают контур полосы и меньше искажают его параметры. Отмеченные особенности можно использовать для выделения «полезного» сигнала и подавления сигнала «помехи» при решении задач прикладной спектроскопии.

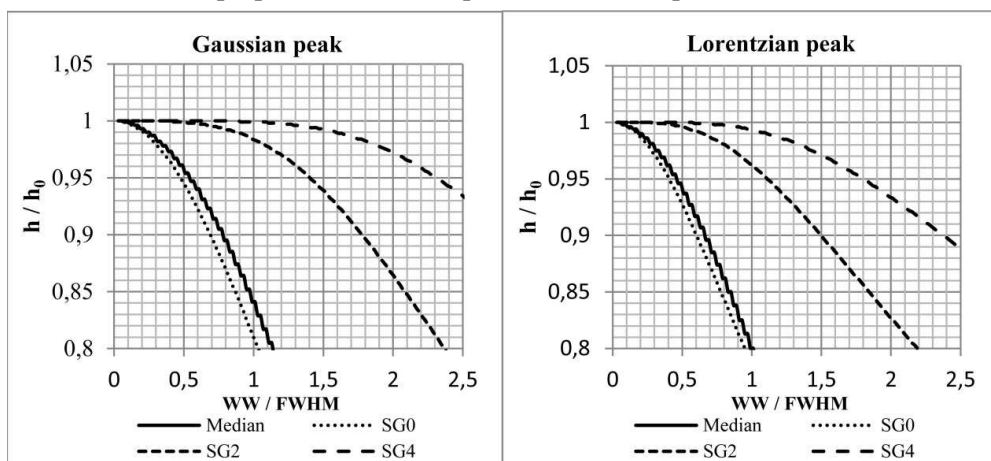


Рис. 3. Изменение относительной интенсивности полосы поглощения в зависимости от относительной ширины окна фильтров для изучения малых искажений

При решении ряда задач спектроскопии конденсированных сред для подавления полос поглощения, имеющих малую полуширину (спектры адсорбированных атомов и молекул, интерференционные полосы, полосы поглощения атмосферы), оптимальнее применять медианный фильтр или фильтр Савицкого–Голая нулевого–первого порядка.

Заключение

Анализ полученных в работе результатов по численному моделированию влияния фильтрации на контуры и положение полос поглощения лоренцевской и гауссовской форм позволяет сформулировать следующие рекомендации по разделению сигналов на «полезный» и «помеху»:

1. Для абсолютного подавления полос поглощения «помех» предпочтительно применение медианного фильтра, при этом для гауссовского контура ширина окна фильтра должна быть в 5 раз больше полной ширины на половине высоты подавляемой полосы поглощения, а для контура лоренцевской формы это соотношение должно быть более 20.

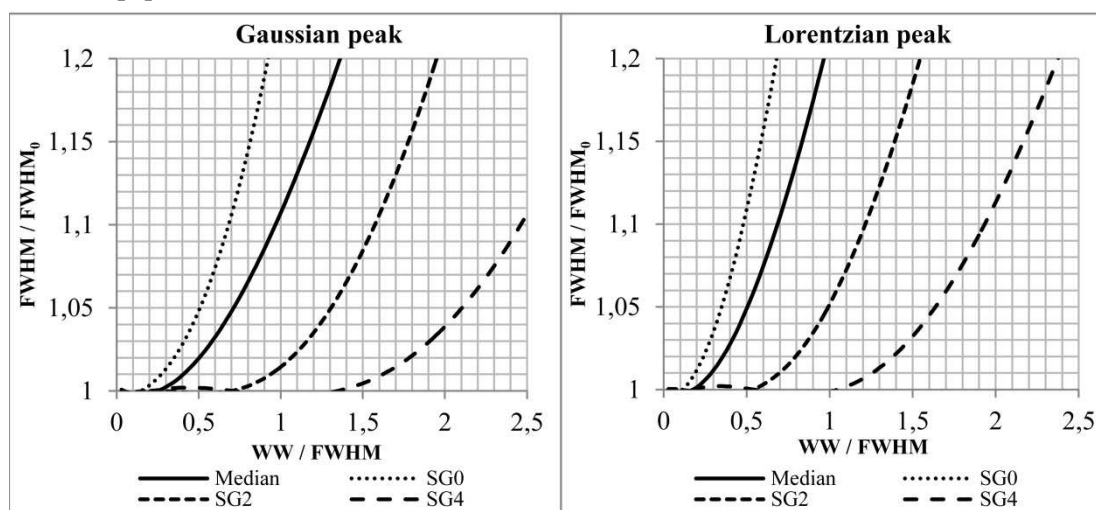


Рис. 4. Изменение относительной полуширины контура поглощения FWHM в зависимости от относительной ширины окна фильтров

2. Для уменьшения искажения интенсивности полосы поглощения менее чем на 1 % можно рекомендовать выбирать относительную ширину окна фильтров для гауссовской формы контура и применении медианного фильтра – 0,2, SG0 – 0,2, SG2 – 0,9, SG4 – 1,6.

Для лоренцевской формы контура и медианного фильтра это соотношение должно быть не более 0,2, для фильтров SG0 – 0,2, SG2 – 0,7, SG4 – 1,1.

Полученные в данной работе результаты моделирования влияния параметров оконных фильтров на положение полос поглощения лоренцевской и гауссовской форм, их интенсивность и полуширину, актуальны при исследовании объектов методами спектроскопии поглощения, излучения, зеркального и диффузного отражения, а также Рамановской спектроскопии.

Литература

1. Bekhterev, A.N. A study of vibrational states in condensed carbon-based media / A.N. Bekhterev, V.M. Zolotarev // Optics and spectroscopy. – 2006. – Vol. 101, no. 6. – P. 877–881.
2. Zolotarev, V.M. Optical researches of structural organization of axisymmetrical polycrystalline fibers / V.M. Zolotarev, A.N. Bekhterev // Proc. SPIE 6026, ICO20: Biomedical Optics. – January 11, 2006. – P. 60260–60268.
3. Automated quantitative spectroscopic analysis combining background subtraction, cosmic ray removal, and peak fitting / T.M. James, M. Schlösser, R.J. Lewis *et al.* // Appl. Spectrosc. – 2013. – Vol. 67. – P. 949–959. DOI: 10.1366/12-06766
4. Felinger, A. Data analysis and signal processing in chromatography / A. Felinger // Elsevier Science B.V., 1998. – 413 p.
5. Paradigm shifts in surface metrology. Part II. The current shift / X. Jiang, P.J. Scott, D.J. Whitehouse, L. Blunt // Proc. R. Soc. A. – 2007. – Vol. 463. – P. 2071–2099.
6. Savitzky, A.M. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures / A.M. Savitzky, J.E. Golay // Analytical Chemistry. – 1964. – Vol. 36, no 8. – P. 1627–1639.
7. Enke, C.G. Signal-to-noise ratio enhancement by least-squares polynomial smoothing / C.G. Enke, T.A. Nieman // Analytical Chemistry. – 1976. – Vol. 48. – P. 705a-712a.
8. Ziegler, H. Properties of digital smoothing polynomial (DISPO) filters / H. Ziegler // Appl. Spectrosc. – 1981. – Vol. 35. – P. 88–92.
9. Moore, A.W. Median filtering for removal of low-frequency background drift / A.W. Moore, J.W. Jorgenson // Analytical Chemistry. – 1993. – Vol. 65. – P. 188–191.

Поступила в редакцию 2 марта 2017 г.

SELECTING PARAMETERS OF DIGITAL FILTERS DURING SPECTROPHOTOMETRIC RESEARCH

A.N. Bekhterev, A.Yu. Lednov, N.A. Savinova

Magnitogorsk State Technical University of G.I. Nosova, Magnitogorsk, Russian Federation

E-mail: lednov@mail.ru

In various fields of knowledge when studying changing processes, the response received by a physical instrument allows to nominally divide the analyzed signal into two components: "useful" signal and "disturbances" signal. In particular, while solving tasks on qualitative and quantitative spectrophotometric analysis there occur problems with distortion of absorption bands by disturbances of various natures: presence of uncompensated atmosphere absorption spectra, influence of spectra of molecules adsorbed on a sample's surface, presence of interference noise in thin and multi-layer objects.

This paper provides a comparative analysis of the influence of filtration of model absorption spectrum by median filter and Savitzky–Golay filters of zero-first order (SG0), second-third order (SG2), and fourth-fifth order (SG4). The model spectrum was described by Gauss and Lorentz absorption contours. Based on the results of the numerical experiment recommendations are given on optimal filtration of experimental absorption spectra of condensed mediums for their further analysis and processing:

– for complete suppression of "disturbances" absorption bands the use of median filter is preferable, while for Gauss contour the filter bandwidth should be 5 times bigger than the full width at the half height of the suppressed absorption band, and for Lorentz contour this ratio should exceed 20;

– changing of the relative intensity of the "useful" signal absorption band by less than 1 % is fulfilled at a certain relative bandwidth. In case of Gauss absorption band the relative bandwidth for median filter should not exceed 0,2, for filters SG0 – 0,2, SG2 – 0,9, SG4 – 1,6. For Lorentz contour this ratio should for median filter not exceed 0,2, for filters SG0 – 0,2, SG2 – 0,7, SG4 – 1,1.

Keywords: digital filtering; absorption line shape; signal processing; spectrophotometry, spectroscopy.

References

1. Bekhterev A.N., Zolotarev V.M. A study of vibrational states in condensed carbon-based media. *Optics and Spectroscopy*, 2006, Vol. 101, no 6. pp. 877–881. DOI:10.1134/S0030400X06120095
2. Zolotarev V.M., Bekhterev A.N. Optical researches of structural organization of axisymmetrical polycrystalline fibers. *Proc. SPIE 6026, ICO20: Biomedical Optics*, January 11, 2006, pp. 60260–60268. DOI:10.1117/12.667182
3. James T.M., Schlösser M., Lewis R.J., Fischer S., Bornschein B., Telle H.H., Automated quantitative spectroscopic analysis combining background subtraction, cosmic ray removal, and peak fitting. *Appl. Spectrosc.*, 2013, Vol. 67, pp. 949–959. DOI: 10.1366/12-06766
4. Felinger A. *Data analysis and signal processing in chromatography*. Elsevier Science B.V., 1998, 413 p.
5. Jiang X., Scott P.J., Whitehouse D.J, Blunt L. Paradigm shifts in surface metrology. Part II. The current shift. *Proc. R. Soc. A*, 2007, Vol. 463, pp. 2071–2099. DOI: 10.1098/rspa.2007.1873
6. Savitzky A.M., Golay J.E. Smoothing and differentiation of data by simplified least squares procedures, *Analytical Chemistry*, 1964, Vol. 36, no 8, pp. 1627–1639. DOI: 10.1021/ac60214a047
7. Enke C.G., Nieman T.A., Signal-to-noise ratio enhancement by least-squares polynomial smoothing. *Analytical Chemistry*, 1976, Vol. 48, pp. 705a–712a. DOI: 10.1021/ac50002a769
8. Ziegler H. Properties of digital smoothing polynomial (DISPO) filters. *Appl. Spectrosc.*, 1981, Vol. 35, pp. 88–92. DOI: 10.1366/0003702814731798
9. Moore A.W., Jorgenson J.W. Median filtering for removal of low-frequency background drift. *Analytical Chemistry*, 1993, Vol. 65, pp. 188–191. DOI: 10.1021/ac00050a018

Received March 2, 2017

МЕТОД ЛОКАЛЬНОГО ИЗМЕРЕНИЯ ТОЛЩИНЫ ТОНКИХ МЕТАЛЛОИЗДЕЛИЙ С ПОМОЩЬЮ УЛЬТРАЗВУКА

С.Ю. Гуревич, Ю.В. Петров, Е.В. Голубев

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

E-mail: gurevichsi@susu.ru

При возбуждении ультразвуковых (у.з.) волн Лэмба в тонких металлических пластинках и листах с помощью термоакустического излучателя диаметром от 3 мм и больше происходит изменение формы у.з. импульса. С увеличением диаметра первоначальный импульс начинает разделяться на два. Считается, что за счет градиента температуры источниками разделенных у.з. импульсов являются диаметрально противоположные края ТА-излучателя (термоакустического излучателя). Время отставания этих импульсов относительно друг друга определяется диаметром ТА-излучателя и скоростью распространения волн Лэмба. Этот факт можно использовать для локального измерения скорости волн, поскольку длина участка, на котором производится измерение, не превышает диаметра ТА-излучателя. На основании зависимости между скоростью у.з. волн Лэмба от толщины пластинки и частоты колебаний предложена методика экспериментального измерения толщины пластинки. Проведена оценка доверительных границ суммарных относительной и абсолютной погрешностей измерений. Для сравнения была проведена такая же оценка для случая измерения толщины образца с помощью микрометра. Сделан вывод о том, что если погрешность в измерении толщины металлических листов и пластинок допускается равной или более 5,0 %, то метод измерения с помощью у.з. волн, возбуждаемых оптическими наноимпульсами, можно успешно применять на производстве. Кроме того, этот метод является весьма перспективным при контроле толщины крупногабаритных тонких металлоизделий.

Ключевые слова: толщина металлоизделия; лазерное возбуждение; волны Лэмба; термо-акустический излучатель; ЭМА-приемник; дисперсионные кривые.

Введение

Одним из практических применений в ультразвуковой дефектоскопии волн Лэмба является измерение толщины тонких металлических изделий (пластин, листов, лент, оболочек и т. п.). Особенно актуален этот вопрос в случаях, когда изделия являются крупногабаритными, а также, когда измерения возможны только при одностороннем доступе к изделию [1–3].

Методика проведения исследований

Скорость распространения волн Лэмба в изделии определяется его толщиной и частотой акустических колебаний [3, 4]. Количественную связь между этими параметрами можно установить, если проанализировать дисперсионные кривые – зависимости групповых скоростей волн Лэмба от толщины изделия и частоты колебаний. В этом случае задача измерения толщины листовых металлоизделий сводится к экспериментальному измерению скорости волн Лэмба и частоты акустических колебаний в них. В работе [5] предложен способ локального измерения групповой скорости волн Лэмба, возбуждаемых термоакустическим излучателем (ТА-излучателем) с постоянной мощностью теплового излучения. Было установлено, что с увеличением диаметра ТА-излучателя форма возбуждаемого ультразвукового импульса изменяется, происходит его разделение на два импульса, причем источниками разделенных акустических импульсов являются противоположные края ТА-излучателя, где имеет место градиент температуры металла. Время отставания этих импульсов относительно друг друга определяется диаметром ТА-излучателя и скоростью распространения ультразвука. Тогда скорость волн Лэмба на участке изделия, длина которого не превышает диаметра ТА-излучателя (лазерного луча), можно рассчитать по формуле

$$v = S / \Delta t ,$$

где S – расстояние между краями ТА-излучателя (его диаметр), Δt – время прохождения ультразвуком этого расстояния.

В качестве примера определим по предложенной методике толщину шлифованной пластинки инварного сплава размерами $270 \times 60 \times 0,60$ мм. Толщина пластинки измерялась стандартным микрометром. На рис. 1 приведена экспериментальная осциллограмма у.з. импульса волны Лэмба. Диаметр ТА-излучателя 9,7 мм, средняя мощность теплового излучения $P = 2,8$ Вт. Регистрируются волны Лэмба широкополосным ЭМА-приемником [6].

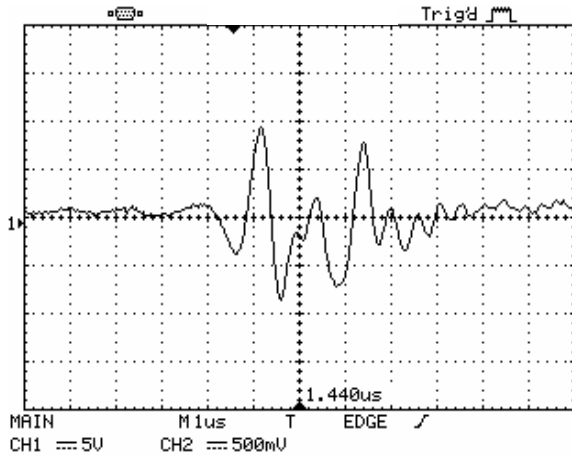


Рис. 1. Импульс у.з. волн Лэмба от ТА-излучателя диаметром 9,7 мм

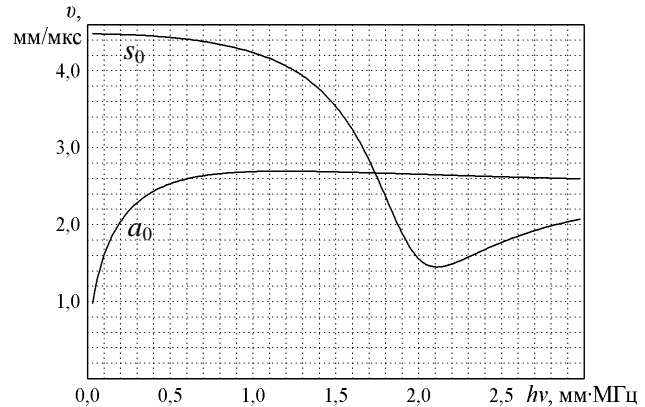


Рис. 2. График дисперсионных кривых групповых скоростей симметричных и антисимметричных волн Лэмба нулевой, первой и второй мод

Из осциллограммы следует, что среднее время $\langle \Delta t \rangle = 2,2$ мкс, средняя частота колебаний $\langle \nu \rangle = 0,85$ МГц. Тогда средняя групповая скорость у.з. волн Лэмба

$$\langle v \rangle = \frac{9,7}{2,2} = 4,41 \left(\frac{\text{мм}}{\text{мкс}} \right).$$

Расчеты зависимости групповых скоростей волн Лэмба от толщины пластинки и частоты (дисперсионные кривые) выполнялись по формулам, взятым из [3]. Скорости поперечных и продольных волн, входящие в эти формулы, были соответственно равны 2683 и 4878 мм/мкс [7]. Результаты расчетов симметричных и антисимметричных волн Лэмба трех низших номеров представлены в виде графика $v = f(h \cdot \nu)$ на рис. 2.

Из графика следует, что экспериментально измеренная групповая скорость соответствует симметричной волне Лэмба нулевой моды. Из точки дисперсионной кривой, соответствующей этой скорости, опускаем нормаль на ось $h\nu$ и находим численное значение параметра $k = h\nu = 0,53$ мм·МГц. После этого рассчитываем среднюю толщину пластинки

$$\langle h \rangle = \frac{0,53}{0,85} = 0,63 \text{ мм.}$$

Оценим погрешность полученного результата [8]. Расчетной формулой является выражение $h = k / \nu$. Считаем, что погрешность параметра k определяется погрешностью измерения скорости ν волн Лэмба. Систематическая относительная погрешность при косвенных многократных измерениях толщины пластинки определяется в основном максимальной погрешностью цифрового осциллографа и равна 1,4 %. Случайная относительная погрешность, которую рассчитываем с помощью доверительного интервала, составляет 4,2 %. Величина доверительной границы суммарной погрешности σ_h равна 4,4 %. В результате получаем:

$$h = 0,63 \pm 0,03 \text{ мм, } \sigma_h = 4,4 \% .$$

Определим толщину этой же пластины путем многократных прямых измерений стандартным микрометром. Систематическая погрешность прибора – 0,7 %. Случайная погрешность рассчитывается с помощью доверительного интервала и составляет 1,7 %. Величина доверительной границы суммарной погрешности σ_h^* равна 1,8 %. В результате получаем:

$$h^* = 0,60 \pm 0,01 \text{ мм, } \sigma_h^* = 1,8 \% .$$

Выводы

1. Используя зависимость скорости волн Лэмба от толщины изделия и частоты акустических колебаний, предложен метод измерения толщины тонких металлоизделий.

2. Скорость и частота колебаний определялись экспериментально при генерации волн Лэмба в тонких металлических изделиях с помощью лазерных импульсов наносекундной длительности. Длина участка изделия, на котором измерялась скорость, не превышает толщины лазерного луча.

3. Проведена оценка погрешностей измерения толщины. Если нижняя граница относительной погрешности допускается равной или больше 5 %, то предложенный метод измерения является весьма перспективным, особенно когда объекты контроля имеют значительные габариты и доступ к измерениям является односторонним.

Статья выполнена при поддержке Правительства РФ (Постановление № 211 от 16. 03. 2013 г.), соглашение № 02. АОЗ. 21. 0011.

Литература

1. Шрайбер, Д.С. Ультразвуковая дефектоскопия / Д.С. Шрайбер. – М.: Металлургия, 1965. – 361 с.

2. Ермолов, И.Н. Теория и практика ультразвукового контроля / И.Н. Ермолов. – М.: Машиностроение, 1981. – 240 с.

3. Викторов, И.А. Физические основы применения ультразвуковых волн Релея и Лэмба в технике / И.А. Викторов. – М.: Наука, 1966. – 168 с.

4. Бреховских, Л.М. Волны в слоистых средах / Л.М. Бреховских. – М.: Наука, 1973. – 343 с.

5. Петров, Ю.В. Метод локального измерения скорости волн Лэмба, возбуждаемых лазерными наноимпульсами / Ю.В. Петров, С.Ю. Гуревич // Сборник докладов международного форума «Сварка и диагностика». – Екатеринбург, 25–27 ноября 2014. – С. 296–301.

6. Петров, Ю.В. Оптико-термический излучатель и ЭМА-приемник ультразвуковых волн Лэмба / Ю.В. Петров, С.Ю. Гуревич, Е.В. Голубев // Дефектоскопия. – 2015. – № 5. – С. 17–24.

7. Таблицы физических величин. Справочник / Под ред. И.К. Кикоина. – М.: Атомиздат, 1976. – 1005 с.

8. Зайдель, А.Н. Ошибки измерений физических величин / А.Н. Зайдель. – Л.: Наука, 1986. – 108 с.

Поступила в редакцию 7 декабря 2017 г.

METHOD OF LOCAL MEASUREMENT OF THICKNESS OF THIN METAL PRODUCTS USING ULTRASOUND

S.Yu. Gurevich, Yu.V. Petrov, E.V. Golubev

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: gurevichsi@susu.ru

During excitation of ultrasonic Lamb waves in thin metal plates and sheets using a thermoacoustic emitter with diameter of 3 mm and more, the shape of ultrasonic pulse changes. As the diameter increases the initial pulse starts dividing into two. It is believed that due to temperature gradient the opposite sides of the thermoacoustic emitter act as sources of the divided ultrasonic pulses. The time of retardation of these pulses from one another is defined by the diameter of the thermoacoustic emitter and the velocity of Lamb waves propagation. This fact may be used for local measurement of the wave velocity since the length of the section under measurement does not exceed the diameter of the thermoacoustic emitter. Based on the functional connection between the velocity of ultrasonic Lamb waves and the plate thickness and oscillation frequency a method was suggested on experimental measurement of plate thickness. Confidence boundaries of cumulative relative and absolute measurement errors were assessed. For comparison, a similar assessment was performed for a case of measuring a sample's thickness using a micrometer. A conclusion was made that if error in measuring thickness of metal sheets and plates is accepted as equal to or exceeding 5,0 %, then the method of measurement using ultrasonic waves excited by optical nano-pulses may be successfully used at production enterprises. Moreover, this method is quite promising while monitoring thickness of large-size thin metal products.

Keywords: thickness of metal products; laser excitation; ultrasonic Lamb waves; thermoacoustic emitter; EMAT-receiver; dispersion curves.

References

1. Shrayber D.S. *Ul'trazvukovaya defektoskopiya* (Ultrasonic defectoscopy). Moscow, Metallurgiya Publ., 1965, 392 p. (in Russ.).
2. Ermolov I.N. *Teoriya i praktika ul'trazvukovogo kontrolya* (Theory and practice of ultrasonic testing). Moscow, Mashinostroenie Publ., 1981, 240 p. (in Russ.).
3. Viktorov I.A. *Fizicheskie osnovy primeneniya ul'trazvukovykh voln Releya i Lemba v tekhnike* (Physical basis of application of ultrasonic waves of Rayleigh and Lamb in engineering). Moscow, Nauka Publ., 1966, 167 p. (in Russ.).
4. Brekhovskikh L.M. *Volny v sloistykh sredakh* (Waves in layered media). Moscow, Nauka Publ., 1973, 343 p. (in Russ.).
5. Petrov Yu.V., Gurevich S.Yu. Metod lokal'nogo izmereniya skorosti voln Lemba, vzbuzhdaemykh lazernymi nanoimpul'sami (The method of local measurement of the speed of Lamb waves excited by laser nanopulses). *Sbornik dokladov mezhdunarodnogo foruma "Svarka i diagnostika"* (Proc. of the International Forum "Welding and Diagnostics"), Ekaterinburg, November, 25–27, 2014, pp. 296–301. (in Russ.).
6. Petrov Y.V., Gurevich S.Y., Golubev E.V. A photothermal emitter and an EMA receiver of ultrasonic Lamb waves. *Russian Journal of Nondestructive Testing*, 2015, Vol. 51, no. 5, pp. 272–279. DOI: 10.1134/s106183091505006x
7. Kikoin I.K. (ed.) *Tablitsy fizicheskikh velichin. Spravochnik* (Tables of physical quantities. Handbook). Moscow, Atomizdat Publ., 1976, 1005 p. (in Russ.).
8. Zaydel' A.N. *Oshibki izmereniy fizicheskikh velichin* (Physical Quantities Measurement Errors). Leningrad, Nauka Publ., 1986, 112 p. (in Russ.).

Received December 7, 2017

POPULATION KINETICS OF LOCALIZED STATES IN NANOCOMPOSITE MATERIALS UNDER EXPOSURE TO RADIATION

N.S. Dyuryagina, A.P. Yalovets

South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation

E-mail: nsdiuriagina@susu.ru

We simulated the population of localized states in nanocomposite materials using Rouse-Fowler model. The following radiation effects were considered: prolonged irradiation (over 3 s) with the low absorbed dose rate (0,002 W/kg) and pulsed irradiation (100 ns) with the high absorbed dose rate (over 105 W/kg) of ionizing radiation. We investigated the role of localized states in electrical conductive properties of nanocomposite materials on the example of nanocomposite materials with hole conductivity (polymathimethacrilate (PMMA) + CdS) and electron conductivity (α -Al₂O₃+SrO), as well as in pure PMMA and α -Al₂O₃. Our results indicate that the small traps influence the speed of relaxation to the equilibrium radiation induced electrical conductivity, while the deep traps, the depth of which is much greater than kT , have an impact on the sensitivity to an absorbed dose of ionizing radiation. Moreover, pure PMMA and nanocomposite materials based on it are unsuitable for dosimetry due to a large share of the small traps in the spectrum of intrinsic localized states. On the contrary, aluminum oxide is an almost perfect material for the accumulation of the information about the ionizing radiation, since its spectrum of localized states includes only deep traps. On the whole, the most interesting materials from the dosimetry viewpoint are nanocomposites based on aluminum oxide, where the concentration of impurity centers does not exceed the concentration of intrinsic states, and the nanoparticle radius is no more than 2 nm in case of small share of the small traps in impurity spectrum.

Keywords: nanocomposite material; localized state; localized center; trap; radiation induced electrical conductivity; Rouse-Fowler; dosimetry; polymathimethacrilite (PMMA); CdS; α -Al₂O₃; corundum; SrO.

Introduction

Electrophysical properties of dielectrics and semiconductors are determined by charge carriers kinetics, which depends on the spectrum of localized states stipulated by different structural defects (intrinsic traps). For example, polymethilmethacrilate (PMMA) has an exponential spectrum of localized states for holes [1–2], while the spectrum of localized centers of α -Al₂O₃ includes only deep traps for electrons, that makes possible the usage of this material in dosimetry [3–7].

The introduction of nanoparticles into dielectric matrix material leads to an appearance of additional localized states, which stem from the formation of the potential well due to a difference in Fermi levels of materials at the nanoparticle-matrix interface (impurity traps). In contrast to intrinsic localized traps in the matrix, the concentration and energy spectrum of impurity traps can be changed by varying the concentration and size of nanoparticles. As a result, the nanocomposite materials with new properties can be created.

Based on PMMA+CdS nanocomposite material different photogalvanic and optoelectronic devices are created [8]. Since high-radiation conditions should not affect the instrumental data of these devices, the question arises about radiation resistance of PMMA+CdS. On the other hand, corundum (α -Al₂O₃) and nanocomposite materials on its basis are sensitive to radiation and able to register and save information about absorption dose for a long time, until the sample is exposed to external effects, for example, by heating.

To investigate phenomena mentioned above it is necessary to study the electrophysical properties of nanocomposite materials under radiation effect.

Rouse-Fowler equation system describes the kinetics of charge carriers in the band gap and allows us to describe different electrophysical properties of a dielectric material. In the frame of Rouse-Fowler

model, the radiation electrical conductivity of polymer materials [3, 9–11] and the dose dependence of termostimulated luminescence of the pure $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ under radiation effect with low dose rates [4–7] were investigated. The existing solutions of Rouse–Fowler equation system consider only pure materials, where energy spectrum of traps has one or two energy levels [4–7], or the case, where trap energy distribution follows the exponential law [3, 9–11]. To describe the electrophysical properties of nanocomposite materials we need to solve Rouse–Fowler equation system for a random spectrum of localized states.

This work aims to investigate physical processes, which determine the kinetics of charge carrier in the pure PMMA and $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$, as well as in nanocomposite materials made of them, under gamma-rays exposure with low and big dose rates. By knowing these physical processes we could evaluate the possibility of application of these materials in dosimetry. Since electrophysical properties of nanocomposite materials are determined by intrinsic and impurity localized states, here we studied the population of localized states.

Mathematical model

Properties of polymer materials are well understood. In polymer the distribution of intrinsic localized states, which stem from defects of the matrix materials, follows the exponential law [3]:

$$N(E) = N_0/kT_1 \exp(-E/kT_1),$$

where N_0 is the full concentration of intrinsic traps, T_1 is the distribution parameter.

To calculate the energy spectrum of localized states originated from the spherical nanoparticle introduction into the matrix material, we solved the Schrodinger equation with the following potential [12]:

$$U(r) = \begin{cases} -U_0, & r \leq R_{pat}; \\ -U_0 R_{pat} \cdot \exp(-(r - R_{pat})/r_D)/r, & r > R_{pat}, \end{cases}$$

where R_{pat} is the nanoparticle radius, $U_0 = |W_m - W_{pat}|$ is the deep of the potential, W_m and W_{pat} are work functions for the matrix and the nanoparticle, respectively, r_D – the shielding length, which determines the width of the potential well. The radius r_D is determined so that the number of states in the potential well was not less than $q_{pat}/2e$, where $q_{pat} = C_{pat} \cdot U_0$ is the nanoparticle charge, C_{pat} is the nanoparticle capacitance [12].

Rouse–Fowler equation system, which describes the kinetics of free and localized on traps carrier, has the form:

$$\dot{n} = S - \alpha n \left[p + \sum_{l=1}^{l_0} p_l \right] - n \sum_{m=1}^{m_0} K_m + \sum_{m=1}^{m_0} \frac{n_m}{\tau_m} + S_{pat}; \quad (1)$$

$$\dot{p} = S - \alpha p \left[n + \sum_{m=1}^{m_0} n_m \right] - p \sum_{l=1}^{l_0} K_l + \sum_{l=1}^{l_0} \frac{p_l}{\tau_l}; \quad (2)$$

$$\dot{n}_m = K_m n - \frac{n_m}{\tau_m} - \alpha p n_m - S'_{pat} \delta_{m, m_0}, \quad 1 \leq m \leq m_0; \quad (3)$$

$$\dot{p}_l = K_l p - \frac{p_l}{\tau_l} - \alpha n p_l + (S_{pat} - S'_{pat}) \delta_{l, \tilde{l}_0 + 1}, \quad 1 \leq l \leq l_0, \quad (4)$$

where n , p are the concentrations of free electrons and holes; n_m and p_l are the concentrations of trapped electrons and holes; m_0 and l_0 are the numbers of energy levels for electrons and holes; $1 \leq m \leq \tilde{m}_0$ and $1 \leq l \leq \tilde{l}_0$ are indexes for intrinsic traps; $(\tilde{m}_0 + 1) \leq m \leq m_0$ and $(\tilde{l}_0 + 1) \leq l \leq l_0$ are indexes for impurity traps; α is the recombination coefficient; $\tau_{m,l} = \nu_{m,l}^{-1} \exp(E_{m,l}/kT)$ are life times of charge carriers on electron and hole traps, $\nu_{m,l}$ are frequency factors. $K_m = k_m (M_m - n_m)$ and $K_l = k_l (L_l - p_l)$, where $k_{m,l}$ are capture coefficients, M_m and L_l are the concentrations of electron and

hole traps, respectively. S and S_{pat} are the volumetric generation rates of free charge carriers due to the ionization of the matrix material and the nanoparticle, respectively. For donor inclusion the generation rate is $S'_{pat} = S_{pat}$, for acceptor one $S'_{pat} = 0$.

The last summands in (3) and (4) take into account the fact that under ionization of the donor inclusion the electron localized on the deepest trap becomes free, while the ionization of the acceptor inclusion leads to the hole localization on the top level [12].

The general idea of the system (1)–(4) solving is finding the approximate analytical solution for a certain time interval $\Delta t = t_{k+1} - t_k$, which we choose to minimize the bias of the found analytical solution.

The generation rates of charge carrier pairs in the matrix materials and the inclusion are determined by formulas:

$$S = (1 - f_{pat}) \rho D / w_i, \quad S_{pat} = f_{pat} \cdot (\rho D / w_i)_{pat},$$

where ρ is the mass density of matter, D is the radiation energy absorbed by unit mass of substance per unit time, w_i is the average energy of free charge carrier pair generation, f_{pat} is the volume ration of nanoparticles in nanocomposite materials, the values in brackets with the *pat* index are determined for nanoparticles.

Previously, we showed that the ionization of inclusion has the contribution to the ionization of nanocomposite materials, comparable with the ionization of matrix material [12].

The capture coefficient of free charge carrier on the level with energy E is determined by the formula $k_E = \nu \sigma_a(E)$, where ν is the speed of free charge carrier (Fermi speed), $\sigma_a(E) = \pi r_E^2 K_a$ – the capture cross-section. Here r_E is the radius of localized states with the energy E , which is determined from the condition $U(r_E) = E$, K_a is the probability of the charge capture.

The frequency factor characterizes the release of trapped charge carriers from level with energy E . It determined by the formula $\nu_E = h / (4r_E^2 m_*)$, where h is Planck constant, m_* – the effective mass of the charge carrier.

The parameters K_a and m_* are evaluated from the estimation that the physical nature of the capture on intrinsic and impurity centers is the same. Since the radius of the intrinsic center, determined by structure defects, has the order of 1 nm, the values of the capture coefficient and the frequency factor for the small size impurity center (1 nm) will be comparable to the values for the intrinsic traps. As a result, the following constants were obtained: for the acceptor inclusion are $K_a \sim 10^{-6}$, $m_* \sim 10^{-2} - 10^{-9} m_e$, (m_e – the electron mass), for the donor inclusion are $K_a \sim 10^{-9} - 10^{-14}$, $m_* \sim m_e$.

Given that the impurity spectrum of localized states belongs to one nanoparticle, it is highly probable that charge carriers trapped on the impurity localized state will be trapped on the deeper level, as they tend to the minimum energy. Thus, considering the excitation of charge carrier within the potential well, the concentration of the charge carrier $n_m(p_i)$ localized on the impurity trap with energy $E_m(E_i)$ follows Boltzmann distribution.

We tested the method for calculation of the charge carrier kinetics on the case of two traps and on the case of the exponential distribution of the localized states. We showed [12], that the values of radiation induced electrical conductivity calculated by this method are in the good agreement with results obtained by other authors.

It is important to note, that we consider only low values of absorbed energy (below 10^3 J/kg), so the heating does not exceed a few Kelvin degrees. It allows us to neglect the temperature effects. Radiation damages are not considered, so the concentration of localized centers is constant.

Results and discussions

For further analysis of the role of localized states in the formation of conductive properties of the nanocomposite materials, it is convenient to mark the deep traps with the energy $|E_n| \gg kT$. The deep traps are characterized by a lifetime sufficient for charge retention without external action.

PMMA possess a hole conductivity and its intrinsic trap spectrum follows the exponential law with the distribution parameter $T_1 = 2150$ K and the full concentration $N_0 = 10^{25} \text{ m}^{-3}$ [13]. By discretization of the continuum spectrum of the intrinsic localized states, we obtained 16 energy levels with the energy range from 0,05 to 0,93 eV. Other parameters for calculation of the charge carrier kinetics in PMMA are $\alpha = 10^{-14} \text{ m}^3/\text{s}$, $k_E = 10^{-16} \text{ m}^3/\text{s}$, $\nu_E \sim 10^4 \text{ s}$ [3].

The introduction of the CdS nanoparticles into PMMA leads to the formation of the hole potential well with the deep of 1,37 eV. For nanoparticle with radius 2 nm the 3 energy levels ($E_m = 0,52; 0,99; 1,27$ eV) are formed, which are deep at the room temperature. Increase in size of nanoparticles leads to increase in a number of energy levels in the bandgap and to the appearance of the small traps. For CdS nanoparticle with radius 5 nm, 9 energy levels are formed with 2 traps, which are small at 300 K. For nanoparticle with radius 10 nm – 5 of 19 traps are small.

The kinetics of charge carriers in the PMMA+CdS nanocomposite materials was simulated in two stages. On the first stage, the established electrical conductivity of the unirradiated nanocomposite materials was calculated with the following initial conditions: all intrinsic traps are empty, all impurity traps are filled. The populations of localized traps obtained on the first stage were used as the initial condition for the kinetics calculation of the charge carriers under radiation effect on the second stage.

Figure 1 shows that after irradiation the electrical conductivity tends to the value, that remains constant ($R_{\text{pat}} = 2$ nm) or slowly changes ($R_{\text{pat}} = 5$ nm). We will call this value the equilibrium value due to the equilibrium between processes of the charge carrier recombination, the charge carrier capture on traps and the charge carrier release from them. For the pure PMMA and for the nanocomposite material, when the radius inclusion is $R_{\text{pat}} = 10$ nm, the equilibrium is reached much later, than it is shown on Fig. 1 ($\sim 10^6$ s). The equilibrium value of the radiation-induced electrical conductivity depends on the size and the concentration of the nanoparticles due to the appearance of additional charge carriers, which release from the impurity centers [12].

As the calculations of radiation-induced electrical conductivity for pure PMMA were carried out for the initial condition (all intrinsic traps are empty), we can see the dependence of the intrinsic trap population on the absorbed dose rate (Fig. 2). The existence of deep traps in the spectrum of PMMA makes this material sensitive to radiation, but the high concentration of small traps increases the relaxation time to $\sim 10^6$ s, so pure PMMA is unsuitable for dosimetry (Fig. 1).

In the case when the impurity center concentration exceeds the concentration of the intrinsic centers the introduction of the CdS nanoparticles with the radius from 2 to 10 nm leads to full occupancy of deep intrinsic traps by charge carriers released from the small impurity traps. This nanocomposite can-

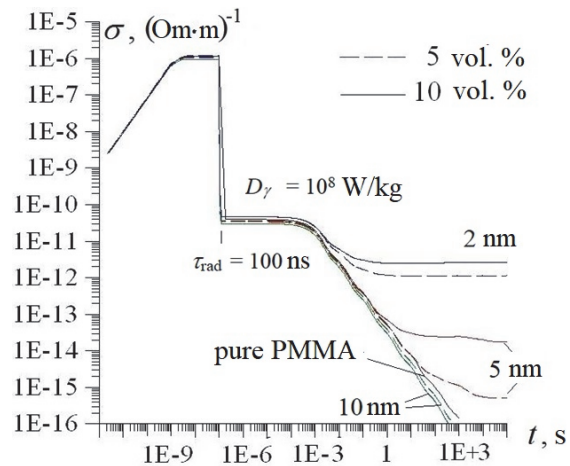


Fig. 1. Dependence of radiation induced electrical conductivity of the pure PMMA and the PMMA with inclusion of CdS nanoparticle on radius R_{pat} . Pulsed irradiation (10^8 W/kg, 100 ns); at $T = 300$ K

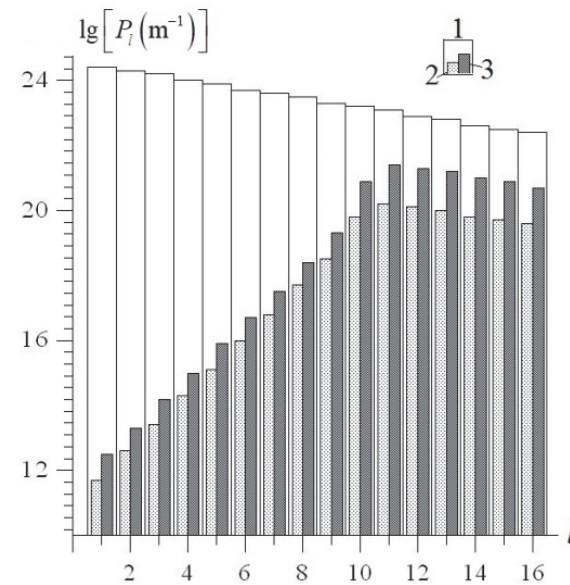


Fig. 2. Dependence of equilibrium population of intrinsic traps for pure PMMA after irradiation on the absorption dose rate: 1 – concentration of localized states; 2, 3 – concentration of trapped charge carriers: 2 – at the absorption dose rate of 10^8 W/kg; 3 – 10^{10} W/kg

not save the information about the absorbed energy because the charge carrier appeared by irradiation are localized by the insufficiently deep for this process traps.

Aluminum oxide has the electron conductivity and its energy spectrum of the intrinsic localized states includes only two deep energy levels with energies $E_1 = 1,3$ eV and $E_2 = 1,6$ eV, and concentrations $M_1 = 10^{21} \text{ m}^{-3}$ и $M_2 = 10^{20} \text{ m}^{-3}$, respectively [4–7]. The absence of small traps in the spectrum of localized states makes this material almost perfect for usage in dosimetry. This material has the short relaxation time (less than 10 s) and the ability to cumulate and save information about the absorbed energy. Since the capture coefficient on the trap with the energy E_2 ($k_2 \sim 10^{-25} \text{ m}^3/\text{s}$) is small, all information about the absorbed energy by the pure aluminum oxide is saved by the trap with the energy E_1 ($k_1 \sim 10^{-20} \text{ m}^3/\text{s}$). Since $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ is able to trap charge carriers for a long time (up to 10^8 s), it is necessary to anneal it to empty the traps before irradiation. Other parameters for calculation of the charge carriers kinetic in $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ are: $\alpha \sim 10^{-19} \text{ m}^3/\text{s}$, $\nu_E \sim 10^{13} \text{ s}^{-1}$ [4].

Figure 3a shows the population of the energy level E_1 depending on the absorbed energy at the $T=300$ K and the different absorbed dose rates by lines 1 (0,002 W/kg) and 2 (pulsed irradiation with duration 100 ns and at the absorbed dose rate from 10^5 W/kg).

In the case of prolonged irradiation (from 3 s) and small absorbed dose rate 0,002 W/kg (line 1, Fig. 3a) the trap with the energy E_1 is filled almost completely and the absorbed energy ~ 100 J/kg. In the case of pulsed irradiation (100 ns) and absorbed dose rate from 10^5 W/kg (line 2, fig. 3a) the population of the trap does not exceed 20 % even at 10^5 J/kg. This difference stems from the fact, that at the high absorbed dose rate the main process during system relaxation is the recombination of the charge carriers, but at the low absorbed dose rate – the capture of the charge carriers by traps.

The lowering of temperature does not influence the localized state population of the pure aluminum oxide.

The introduction of the SrO nanoparticles to aluminum oxide leads to the formation of the electron potential well with the deep of 1,05 eV. For the nanoparticles radius of 2 nm, 6 energy levels with the deeps from 0,01 to 0,84 eV are formed in the potential well. At a room temperature only one level is deep. Increase in the nanoparticle radius to 10 nm leads to increase in a number of energy levels up to 32, and 25 of them are small.

To determine the initial condition of the nanocomposite material (NM) the NM was annealed. The annealing simulation of the NM consisted of two stages. The first stage is heating of the NM up to 600 K (with the heating speed 2 K/s for 1 hour) from the following initial condition: all intrinsic traps are empty, all impurity traps are filled. The second stage is cooling and relaxation of the NM to the equilibrium state at the temperature, at which the NM was further irradiated. The population of the localized states obtained on the second stage will be used as the initial condition to simulate the kinetics of the charge carrier in the NM under radiation effect.

The introduction of 1 vol. % (and more) of SrO nanoparticles with radius below 10 nm leads to the appearance of the impurity centers, which concentration exceeds the concentration of the intrinsic centers. After annealing all intrinsic localized states are completely filled and the resulting conductive properties are determined only by impurity centers. The spectrum of the impurity localized states includes the small traps, which are emptied due to their thermal activation, so the dark conductivity of this NM is much greater than that of pure aluminum oxide and constitutes $\sim 1\text{--}100 (\text{Oh}\cdot\text{m})^{-1}$. The deep traps that should save information of the absorbed energy are always filled in this NM.

The most interesting case is the NM in which the concentration of the impurity centers does not exceed the concentration of the intrinsic centers, and the spectrum of the impurity states does not include small traps. For example, the concentration of the SrO nanoparticles (with the radius of 2 nm) of $5 \cdot 10^{-5}$ vol. % corresponds to the concentration of the impurity states of $1,45 \cdot 10^{19} \text{ m}^{-3}$, which is comparable to the concentration of the deepest intrinsic trap ($\sim 10^{20} \text{ m}^{-3}$).

In Table 1 we present the initial conditions for the calculation of the kinetics of the charge carrier in the $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3\text{+SrO}$ at the temperature 100 and 300 K, obtained after annealing.

In the heating process all impurity traps with deep $E_m \leq E_7$ are almost completely exempted due to the small lifetimes, filling the intrinsic localized states E_1 и E_2 . Because levels with E_2 are completely filled, the intrinsic trap with energy E_1 will play the main role in the storage of charge carriers after irradiation. The impurity energy levels with energies E_7 и E_8 are deep at the temperature 100 K.

The equilibrium populations of the localized states for the Al₂O₃+SrO nanocomposite (nanoparticle radius is 2 nm and concentration is 5·10⁻⁵ vol. %) after the annealing

<i>m</i>	Energy <i>E_m</i> , eV	<i>T</i> = 100 K		<i>T</i> = 300 K	
		Population $\frac{n_m}{M_m} \cdot 100, \%$	Lifetime τ_m, c	Population $\frac{n_m}{M_m} \cdot 100, \%$	lifetime τ_m, c
Intrinsic traps					
1	1,3	5,9	→∞	7,91	~10 ⁸
2	1,6	~ 100	→∞	~ 100	~10 ¹³
Impurity traps					
3–7	0,01 – 0,56	~ 0	~10 ⁻¹² – 10 ¹⁵	~ 0	~10 ⁻¹² – 10 ⁻⁴
8	0,84	67,4	→∞	~ 0	20,6

After irradiation the NM captures charge carriers firstly on the intrinsic trap *E*₁. The dependence of its established population on the absorbed energy and temperature in comparison with the pure aluminum oxide is presented in Fig. 3*a*. In the case of prolonged irradiation (from 3 s) and the low absorbed dose rate 0,002 W/kg (lines 1, 3, 5 in Fig. 3*a*) the trap is filled almost completely at the absorbed energy of 20 J/kg. In the case of pulsed irradiation (100 ns) with the absorbed dose rate from 10⁵ W/kg (lines 2, 4, 6 in Fig. 3*a*), the population of the trap does not exceed 30 % even at the absorbed energy of 10⁵ J/kg. As we mentioned above, at the high absorbed dose rate the main process of the equilibrium establishment is the recombination of the charge carriers, but at the low absorbed dose rate – the capture by traps.

Unlike the pure aluminum oxide, the initial population of the localized states are nonzero, so the established population of the localized states of the nanocomposite materials after irradiation is higher (lines 3–6, Fig. 3*a*) than in the pure aluminum oxide (lines 1–2, Fig. 3*a*).

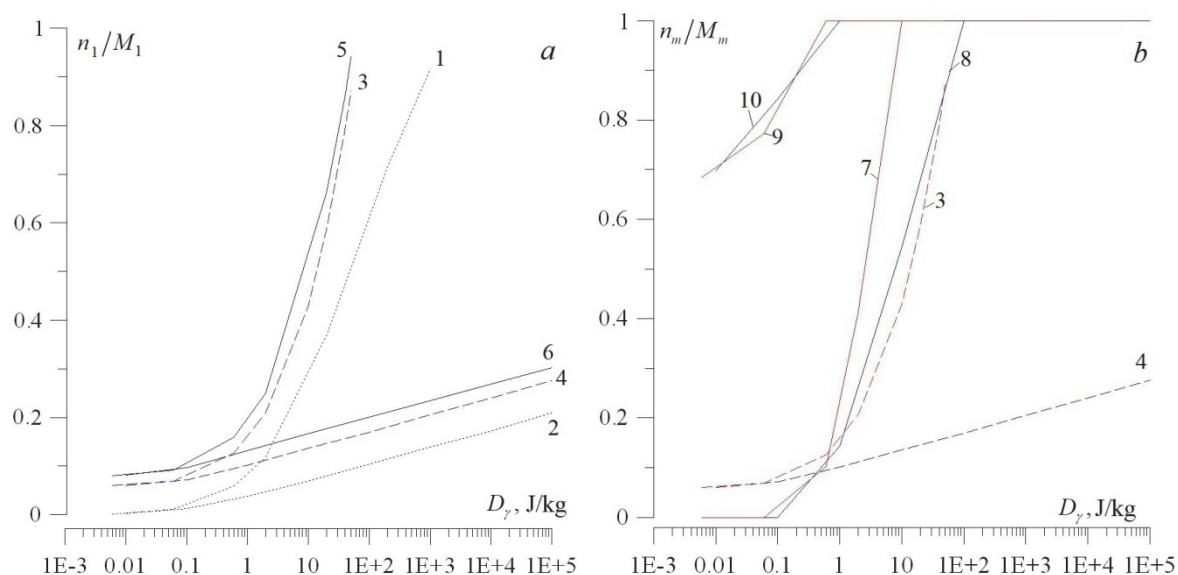


Fig. 3. Established population of intrinsic states with energy of *E*₁ (a) and impurity states with *E*₇, *E*₈ (b) after irradiation depending on absorbed energy: (a) – lines 1,2 are the pure Al₂O₃; 3,4 are the NM at 100K; 5,6 are the NM at 300 K; (b) – population of localized states in the NM at 100 K: lines 3,4 – *E*₁; 7,8 – *E*₇ and 9,10 – *E*₈

The established population of the localized state *E*₁ in the nanocomposite material after irradiation at *T* = 100 K (lines 3 and 4, Fig. 3) is less than at 300 K (lines 5 and 6, Fig. 3*a*), because at low temperature part of charge carriers is retained by the deep impurity traps (lines 7–10, Fig. 3*b*). The impurity localized states with *E_m* ≤ *E*₆ (table) are not deep enough to trap charge carriers even at the 100 K. But with the absorbed energy ~ 5 J/kg in the case of prolonged irradiation (from 3 s) and the low absorbed dose rate 0,002 W/kg (lines 3, 7, 9, Fig. 3*b*) and ~ 100 J/kg in the case of the pulsed irradiation (100 ns) with the absorbed dose rate from 10⁵ W/kg (lines 4, 8, 10, Fig. 3*b*) the impurity traps with energies *E*₇ and *E*₈

are completely filled, so at the greater absorbed energy the main center of capture is the intrinsic trap with the energy E_1 .

The population of the level with energy E_1 in the nanocomposite materials at the low absorbed dose rate (lines 3 and 5, Fig. 3a) increases faster with the rise of the absorbed energy than in pure aluminum oxide (lines 1, Fig. 3a), which indicates the increase of material sensitivity to the absorbed energy (we define sensitivity as dn_1/dD_γ).

Figure 4 shows the time dependence of populations on levels with energies E_1, E_7, E_8 in the NM after irradiation at the temperature of 100 K. The charge accumulation is more effective at the low absorbed dose rates because in this case the basic process in the establishment of equilibrium is the capture of charge carrier by traps.

The relaxation time is determined by the fraction of small traps. For nanocomposite materials at 300 K the relaxation time is ~ 100 s, which is 3 orders of magnitude more, than for pure aluminum oxide. With temperature decrease the fraction of small traps in the nanocomposite reduces. And at 100 K the relaxation time is $\sim 0,1$ s, which is comparable to pure aluminum oxide. The charge retention time of the nanocomposite materials at 300 K is negligibly lower than of pure aluminum oxide ($\sim 10^8$ s).

Conclusion

Localized states play the main role in the formation of electrical conductive properties of both pure and nanocomposite materials. The nanocomposites are promising materials because the possibility of controlling the energy spectrum of impurity localized states, which originates from the nanoparticle inclusion.

The large relaxation time to equilibrium state makes PMMA unsuitable for dosimetry. PMMA+CdS nanocomposite material returns to the equilibrium state fast, but this NM is not able to accumulate the information about the absorbed radiation energy.

From the dosimetry point of view, $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$ has the ideal energy spectrum of intrinsic localized states. The introduction of SrO nanoparticles with concentration from 1 vol. % leads to deep traps filling, making this material incapable to accumulate information about absorbed energy.

In case of the introduction of SrO nanoparticles with concentration of less than 1 vol. %, the basic role in the accumulation of charge carriers is played by the intrinsic trap with the energy of 1,3 eV (this trap is partially filled after annealing). After irradiation even with the absorbed energy of 20 J/kg (prolonged irradiation with the low absorbed dose rate) the trap is almost completely filled, which makes it difficult to accumulate charge carriers in case of longer irradiation. In the case of pulsed irradiation, when the basic process of relaxation to equilibrium state is the charge carrier recombination, the population of the intrinsic trap with the energy of 1,3 eV does not exceed 30 % even with the absorbed dose rate 10^5 J/kg.

Summing up, the creation of the nanocomposite materials should meet the following requirement: the concentration of the impurity localized states, which stems from the nanoparticle introduction, should not exceed the concentration of the intrinsic localized states of the matrix material. Otherwise, the intrinsic deep traps will be completely filled and will not be able to accumulate and save the information about the absorbed radiation energy. The nanoparticle dimensions should not exceed $\sim 2\text{--}5$ nm. The large size of nanoparticles leads to the formation of the large proportion of small traps in the energy

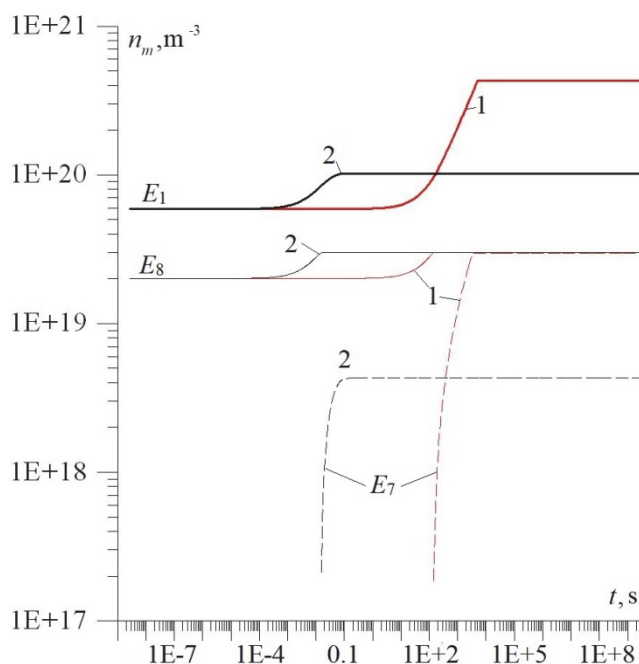


Fig. 4. Kinetics of localized charge carrier in $\text{Al}_2\text{O}_3+\text{SrO}$ (2 nm, $5 \cdot 10^{-5}$ vol.%) under irradiation with absorbed energy of 10 J/kg: 1 – prolonged irradiation (0.002 W/kg, $5 \cdot 10^{-3}$ s); 2 – pulsed irradiation (10^6 W/kg, 100 ns); at $T = 100$ K

spectrum of impurity localized states, that makes the relaxation time long, so the material will not be sensitive to the absorbed radiation energy.

This study was supported in part by the Ministry of Education and Science of the Russian Federation (research work of South Ural State University (Research University)) under state assignment no. 3.9684.2017/BP (no. 2017122-GZ)

References

1. Popov V.K., Bagratashvili V.N., Krotova L.I., Rybaltovskii A.O., Smith D.C., Timashev P.S., Yang J., Zavorotnyi Yu.S., Howdle S.M. A route to diffusion embedding of CdSe/CdS quantum dots in fluoropolymer microparticles. *Green Chemistry*, 2011, Vol. 13, no. 10, pp. 2696–2700. DOI: 10.1039/C1GC15553A
2. Tomczak N., Janczewski D., Han M., Vancso G.J. Designer polymer–quantum dot architectures. *Progress in Polymer Science*, 2009, Vol. 34, Issue 5, pp. 393–430. DOI: 10.1016/j.progpolymsci.2008.11.004
3. Vannikov A.V., Matveev V.K., Sichkar' V.K., Tyutnev A.P. *Radiatsionnye efekty v polimerakh. Elektricheskie svoystva* (Radiation effects in polymers. Electrical properties). Moscow, Nauka Publ., 1982, 273 p. (in Russ.).
4. Kortov V.S., Milman I.I., Nikiforov S.V. *Bulletin of the Tomsk Polytechnic University*, 2000, Vol. 303, pp. 35–45. (in Russ.).
5. Milman I.I., Kortov V.S., Kirpa V.I. *Physics of the Solid State*, 1995, Vol. 37, Issue 4, pp. 1149–1159. (in Russ.).
6. Nikiforov S.V., Kortov V.S., Kazantseva M.G. Simulation of the superlinearity of dose characteristics of thermoluminescence of anion-defective aluminum oxide. *Physics of the Solid State*, 2014, Vol. 56, Issue 3, pp. 554–560. DOI: 10.1134/S1063783414030214
7. Nikiforov S.V., Kortov V.S. Simulation of sublinear dose dependence of thermoluminescence with the inclusion of the competitive interaction of trapping centers. *Physics of the Solid State*, 2014, Vol. 56, Issue 10, pp. 2064–2068. DOI: 10.1134/S1063783414100229
8. Shamilov R.R., Galyametdinov Yu.G. *Bulletin of the Technological University*, 2013, Vol. 16, Issue 15, pp. 322–324. (in Russ.).
9. Tyutnev A.P., Vannikov A.V., Mingaleev G.S. *Radiatsionnaya elektrofizika organicheskikh dielektrikov* (Radiation electrophysics of organic dielectrics). Moscow, Energoatomizdat Publ., 1989, 192 p. (in Russ.).
10. Tyutnev A.P., Sadovnichii D.N., Boev S.G. *High Energy Chemistry*, 1995, Vol. 29, pp. 115–119. (in Russ.).
11. Tyutnev A.P., Saenko V.S., Pozhidaev E.D., Ikhsanov R. Experimental and Theoretical Studies of Radiation-Induced Conductivity in Spacecraft Polymers. *IEEE transactions on plasma science*, 2015, Vol. 43, Issue 9, pp. 2915–2924. DOI: 10.1109/TPS.2015.2403955
12. Dyuryagina N.S., Yalovets A.P. Using Rouse-Fowler model to describe radiation-induced electrical conductivity of nanocomposite materials. *J. Phys.: Conf. Ser.*, 2017, Vol. 830, Issue 1, pp. 12130–12136. DOI: 10.1088/1742-6596/830/1/012130
13. Vaysberg S.E., Sichkar' V.P., Karpov V.L. *Vysokomolekulyarnye soedineniya*, 1971, Vol. (A)13, no. 11, pp. 2502–2507. (in Russ.).

Received November 2, 2017

**КИНЕТИКА НАСЕЛЕННОСТИ ЛОКАЛИЗОВАННЫХ СОСТОЯНИЙ
НАНОКОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ ПРИ РАДИАЦИОННОМ
ВОЗДЕЙСТВИИ****Н.С. Дюрягина, А.П. Яловец**

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

E-mail: nsdiuriagina@susu.ru

В рамках модели Роуза–Фаулера представлены результаты моделирования населенности локализованных состояний нанокomпозиционных материалов при длительном воздействии (больше 3 с) малой мощности (0,002 Вт/кг) и импульсном воздействии (100 нс) большой мощности (от 105 Вт/кг) радиационного облучения. Исследована роль локализованных состояний в проводящих свойствах нанокomпозиционных материалов на примере нанокomпозитов с дырочной (полиметилметакрилат (ПММА) + CdS) и электронной (α -Al₂O₃+SrO) проводимостями, а также чистых ПММА и α -Al₂O₃. Показано, что мелкие ловушки влияют на скорость релаксации к равновесному значению радиационной электропроводности, а доля глубоких ловушек, глубина которых много больше kT , на чувствительность к поглощенной дозе ионизирующего облучения. Показано, что чистый ПММА и нанокomпозиты на его основе не пригодны для дозиметрии из-за большой доли мелких ловушек в спектре собственных локализованных состояний. Спектр оксида алюминия включает в себя только глубокие ловушки, поэтому данный материал является практически идеальным для накопления информации об ионизирующем излучении. Показано, что с точки зрения дозиметрии наиболее интересными являются нанокomпозиты на основе оксида алюминия, в которых концентрация примесных центров не превышает концентрацию собственных локализованных состояний, а размер наночастиц не превышает ~ 2 нм, когда доля мелких ловушек в примесном спектре мала.

Ключевые слова: нанокomпозиционные материалы; локализованные состояния; центры захвата, ловушки, радиационная проводимость; Роуз–Фаулер; дозиметрия; полиметилметакрилат (ПММА); CdS; α -Al₂O₃; корунд; SrO.

Литература

1. A route to diffusion embedding of CdSe/CdS quantum dots in fluoropolymer microparticles / V.K. Popov, V.N. Bagratashvili, L.I. Krotova *et al.* // Green Chemistry. – 2011. – Vol. 13, no. 10. – P. 2696–2700.
2. Designer polymer–quantum dot architectures / N. Tomczak, D. Janczewski, M. Han, G.J. Vancso // Progress in Polymer Science. – 2009. – Vol. 34. – P. 393–430.
3. Ванников, А.В. Радиационные эффекты в полимерах. Электрические свойства / А.В. Ванников, В.К. Матвеев, В.К. Сичкар, А.П. Тютнев. – М.: Наука, 1982. – 273 с.
4. Кортков, В.С. Твердотельная дозиметрия / В.С. Кортков, И.И. Мильман, С.В. Никифоров // Известия Томского политехнического университета. – 2000. – Т. 303. – С. 35–45.
5. Мильман, И.И. Температурное тушение в люминесценции анионодефектных кристаллов α -Al₂O₃ / И.И. Мильман, В.С. Кортков, В.И. Кирпа // ФТТ. – 1995. – Т. 37, Вып. 4. – С. 1149–1159.
6. Никифоров, С.В. Моделирование сверхлинейности дозовых характеристик термолюминесценции анион-дефектного оксида алюминия / С.В. Никифоров, В.С. Кортков, М.Г. Казанцева // ФТТ. – 2014. – Т. 56, Вып. 3. – С. 536–541.
7. Никифоров, С.В. Моделирование сублинейной дозовой зависимости термолюминесценции с учетом конкурирующего взаимодействия центров захват / С.В. Никифоров, В.С. Кортков // ФТТ. – 2014. – Т. 56, Вып. 10. – С. 1999–2003.

8. Шамилов, Р.Р. Композиты полиметилметакрилата на основе квантовых точек CdSe и CdSe/CdS, синтезированных в водно-этанольной среде / Р.Р. Шамилов, Ю.Г. Галяметдинов // Вестник Казанского технологического университета. – 2013. – Т. 16, Вып. 15. – С. 322–324.
9. Тютнев, А.П. Радиационная электрофизика органических диэлектриков / А.П. Тютнев, А.В. Ванников, Г.С. Мингалеев. – М.: Энергоатомиздат, 1989. – 192 с.
10. Тютнев, А.П. Численный анализ модели Роуза–Фаулера–Вайсберга / А.П. Тютнев, Д.Н. Садовничий, С.Г. Боев // Радиационная химия. – 1995. – Т. 29, Вып. 2. – С. 115–119.
11. Experimental and Theoretical Studies of Radiation-Induced Conductivity in Spacecraft Polymers / A.P. Tyutnev, V.S. Saenko, E.D. Pozhidaev, R. Ikhsanov // IEEE transactions on plasma science. – 2015. – Vol. 43, Issue 9. – P. 2915–2924.
12. Dyuryagina, N.S. Using Rouse-Fowler model to describe radiation-induced electrical conductivity of nanocomposite materials. / N.S. Dyuryagina, A.P. Yalovets // J. Phys.: Conf. Ser. – 2017. – Vol. 830, Issue 1. – P. 12130–12136.
13. Вайсберг, С.Э. Исследование радиационной электропроводности полимеров / С.Э. Вайсберг, В.П. Сичкарь, В.Л. Карпов // Высокомолекулярные соединения. – 1971. – Т. (А)13, Вып. 11. – С. 2502–2507.

Поступила в редакцию 2 ноября 2017 г.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СРОДСТВА К ЭЛЕКТРОНУ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛЯРНЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ ПО АВТОКОРРЕЛЯЦИОННЫМ ПАРАМЕТРАМ СПЕКТРОВ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

К.Ф. Латыпов, М.Ю. Доломатов, Р.З. Бахтизин

Башкирский государственный университет, г. Уфа, Российская Федерация

E-mail: latypovkamil@rambler.ru

Гетероциклические полициклические соединения, содержащие атомы кислорода и азота, являются перспективными материалами для молекулярной электроники. Обширная область применения таких соединений требует информацию об электронной структуре, в частности, энергии сродства к электрону, которое, наряду с потенциалами ионизации, определяет процессы транспорта электронов, дно и потолок запрещенной зоны, энергию квазиуровня Ферми и работу выхода. Для гетероциклических молекулярных полупроводников (ГМП), содержащих атомы азота и кислорода, установлена связь между сродством к электрону и интегральными автокорреляционными характеристиками оптического спектра в УФ и видимой области на основе представлений спектров поглощения как совокупности возбужденных электронных состояний в сильно коррелированной электронной системе. Спектры поглощения молекул регистрировались в оптически прозрачных средах на спектрофотометре СФ-2000 с шагом 1 нм. Показано, что в рядах гетероциклических молекулярных сред с ростом интегральной автокорреляционной характеристики спектра сродство к электрону возрастает по квазилинейному закону. Особенностью электронной структуры гетероциклических соединений, содержащих атомы кислорода и азота, являются эффекты сильного обменного и кулоновского корреляционного взаимодействий электронов. Результаты подтверждены данными экспериментов по регистрации спектров оптического поглощения растворов ГМП в диапазоне 200–600 нм, а также квантово-химическими расчетами с применением методов Хартри–Фока. Полученные результаты обоснованы статистической обработкой данных методами наименьших квадратов и математической статистики.

На основе установленных закономерностей разработан метод определения сродства к электрону ГМП. Разработан метод, который позволяет оценить сродство к электрону по спектрам оптического поглощения в УФ и видимой области.

Ключевые слова: сродство к электрону; интегральный параметр автокорреляционной функции; спектры оптического поглощения; молекулярные полупроводники; метод Хартри–Фока.

Информация о потенциале ионизации и сродстве к электрону (СЭ) даёт возможность оценить квазиуровень Ферми, ширину запрещенной зоны и работу выхода [1]. СЭ характеризует энергию, которую необходимо затратить для присоединения электрона к атомам или молекулам. Ранее в исследованиях оптических спектров поглощения гетероциклических соединений установлен эффект, связывающий СЭ с интегральным параметром автокорреляционной функции (ИАКФ) сигнала [2, 3].

Для гетероциклических молекулярных полупроводников (ГМП), содержащих атомы кислорода, подобные исследования не проводились. Целью работы являлось исследование взаимосвязи СЭ и ИАКФ ГМП.

В качестве ИАКФ использовано обобщенное интегральное преобразование в виде произведения основной и запаздывающей логарифмической функции от молярного коэффициента поглощения.

$$I_A = \int_{E_1}^{E_2} \lg \varepsilon(E) \cdot \lg \varepsilon(E + \Delta E) dE, \quad (1)$$

где I_A – ИАКФ, эВ; E – энергия излучения, эВ; E_1, E_n – границы спектра, эВ; $\varepsilon(E)$ – коэффициент молярного поглощения, $10^{-1} \text{ м}^2 \cdot \text{моль}^{-1}$.

Физический смысл ИАКФ, очевидно, состоит в том, что этот параметр показывает взаимосвязь резонансных состояний, которые соответствуют электронным переходам, обуславливающим оптический спектр.

В качестве объектов исследования были выбраны 66 ГМП, содержащих атомы азота и кислорода. Спектры оптического поглощения в диапазоне от 200 до 600 нм регистрировали на спектрофотометре СФ-2000 в оптически прозрачных средах в кварцевых кюветах с длиной оптического пути 1 см. Отдельные спектры выбирались из базы данных [4]. На рис. 1 представлены соответствующие спектры типичных ГМП: 7-метокси-бензоантрацен и 2-аминопирен. СЭ получали путем расчета метод Хартри–Фока RHF 6-31G** [5], используя теорему Купманса, согласно которой СЭ численно равна энергии низших свободных молекулярных орбиталей (НСМО), взятых с противоположным знаком.

В результате обработки экспериментальных данных методом наименьших квадратов установлена квадратичная зависимость между СЭ и ИАКФ вида

$$EA = \chi_1 + \chi_2 I_A + \chi_3 I_A^2, \quad (2)$$

где EA – сродство к электрону, эВ; χ_{1-3} – эмпирические коэффициенты, постоянные для близких по электронному строению соединений. Коэффициенты χ_{1-3} имеют размерности [эВ], безразмерную величину и [эВ⁻¹], соответственно.

Зависимость (2) объясняется с позиции теории возмущения. Оценим возмущение энергии НСМО ($E_{НСМО}$) для данного класса ГМП под влиянием всей резонансной квантовой системы, которая характеризуется интегральными автокорреляционными параметрами $f(E)$.

$$-E_{НСМО} = a_1 + a_2 f(E) + a_3 f^2(E) \quad (3)$$

Принимая $EA = -E_{НСМО}$, $I_A = f(E)$, $\chi_i = a_i$, приходим к выражению (2), полученному ранее. Обработка результатов эксперимента свидетельствует о незначительном вкладе возмущения второго порядка $a_3 < 3 \cdot 10^{-4} \text{ эВ}^{-1}$, которым можно пренебречь, тогда (2) приобретает квазилинейный вид

$$EA = \chi_1 + \chi_2 I_A. \quad (4)$$

В табл. 1 и рис. 2 представлены результаты обработки спектров поглощения. Коэффициенты (4) для ГМП, содержащих атомы кислорода: $\chi_1 = 0,43 \text{ эВ}$; $\chi_2 = 1,98 \cdot 10^{-2}$; для ГМП, содержащих атомы азота: $\chi_1 = -0,02 \text{ эВ}$; $\chi_2 = 3,44 \cdot 10^{-2}$.

Сравнение рассчитанных по ИАКФ спектра и методом Хартри–Фока СЭ подтверждает адекватность зависимости (4). Статистическая обработка данных подтвердила корректность подхода. Так, для ГМП содержащих атомы кислорода, среднеквадратичное отклонение измерений $\sigma = 0,17 \text{ эВ}$, коэффициент детерминации $R^2 = 0,93$. Соответствующие данные для ГМП, содержащих атомы азота: $\sigma = 0,29 \text{ эВ}$, $R^2 = 0,91$. Отдельные результаты расчетов СЭ по ИАКФ представлены в табл. 2.

Таблица 1

Эмпирические коэффициенты зависимости СЭ и ИАКФ для ГМП

№	Молекулярные полупроводники	$\chi_1, \text{ эВ}$	$\chi_2 \cdot 10^{-2}, \text{ безр.}$	коэфф. детерминации, R^2	Оценка погрешностей		
					ср. ошибка $\delta, \%$	ср. кв. отклонение $\sigma, \text{ эВ}$	коэфф. вариации $V, \text{ безр.}$
1	содержащие атомы кислорода	0,43	1,98	0,93	4,36	0,17	0,18
2	содержащие атомы азота	-0,02	3,44	0,91	11,27	0,29	0,34

Таблица 2

Сопоставления адекватности расчетных и полученных по зависимости (4) СЭ для отдельных ГМП

Молекулярный полупроводник	ИАКФ, эВ	СЭ (расчет), эВ	СЭ по зависимости (4), эВ	абс. погрешн. СЭ по (4), эВ	отн. погрешн. СЭ по (4), %
3-оксипирен	40,35	1,28	1,23	0,05	3,91
4-метоксипирен	40,11	1,23	1,22	0,01	0,81
2-аминоантрацен	32,79	1,28	1,11	0,17	13,28
2-фенилиндо́л	39,15	1,13	1,33	0,2	15,38

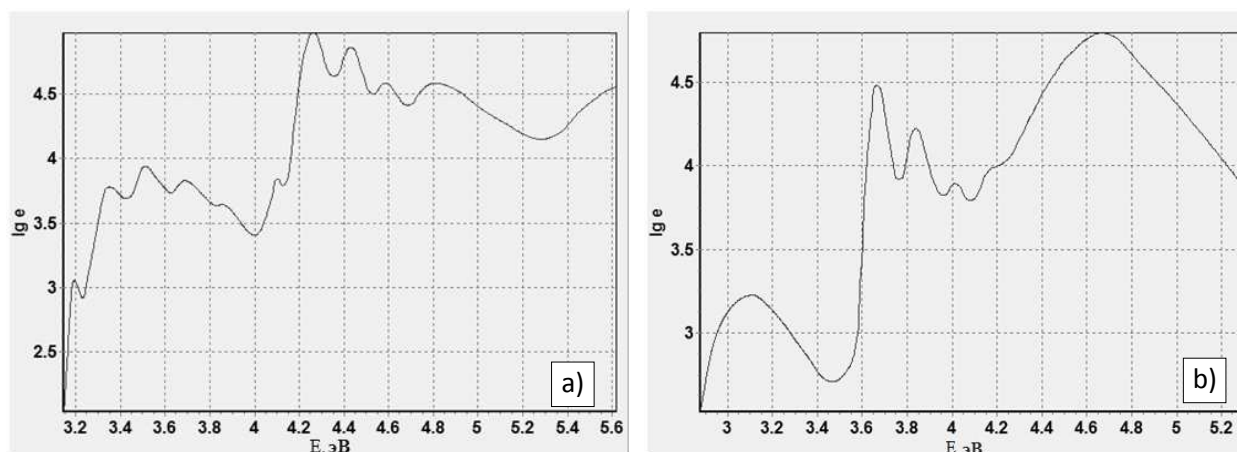


Рис. 1. Оптические спектры поглощения: а) 7-метокси-бензоантрацен; б) 2-аминопирен

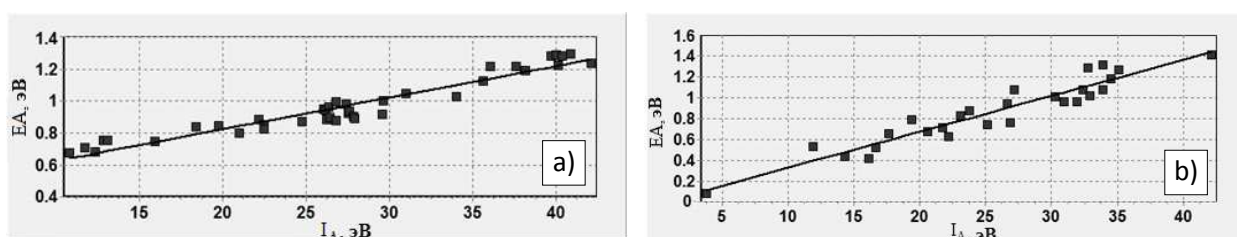


Рис. 2. Взаимосвязь СЭ и ИАКФ для ГМП содержащих атомы: а) кислорода; б) азота

Выводы

Для гетероциклических молекулярных полупроводников установлена связь между средством к электрону и интегральными параметрами автокорреляционной функции оптических спектров поглощения в видимой и УФ-области.

На основе полученных закономерностей разработан новый метод определения средства к электрону для гетероциклических молекулярных полупроводников. Результаты подтверждаются статистической обработкой данных.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №17-42-020616-р_а.

Литература

1. Рамбиди, Н.Г. Физические и химические основы нанотехнологий / Н.Г. Рамбиди, А.В. Берёзкин. – М.: Физматлит, 2008. – 454 с.
2. Доломатов, М.Ю. Применение методов статистической радиофизики для оценки потенциалов ионизации и средства к электрону молекул по спектрам поглощения электромагнитного излучения в петагерцевой области / М.Ю. Доломатов, К.Ф. Латыпов // Электромагнитные волны и электронные системы. – 2017. – Т. 22, № 2. – С. 54–60.
3. Dolomatov, M.Yu. New methods of defining molecular electronic states in nanophotonics and optoelectronics / M.Yu. Dolomatov, K.F. Latypov, M.M. Dolomatova, N.Kh. Paymurzina, E.A. Kovaleva // International Conference «Nanophotonics and micro/nano optics», 07.12.2016–09.12.2016, Paris, France.
4. Большаков, Г.Ф. Ультра-фиолетовые спектры гетероорганических соединений / Г.Ф. Большаков, В.С. Ватаго, Ф.Б. Агрест. – Л.: Химия, 1969. – 504 с.
5. Jensen, F. Introduction to Computational Chemistry / F. Jensen. – England, Southern Gate, Chichester, West Sussex: John Wiley&Sons, Ltd, 2007. – 620 p.

Поступила в редакцию 6 мая 2017 г.

DEFINING OF ELECTRON AFFINITY OF HETEROCYCLIC MOLECULAR SEMICONDUCTORS AS PER AUTOCORRELATION PARAMETERS OF OPTICAL ABSORPTION SPECTRA

K.F. Latypov, M.Yu. Dolomatov, R.Z. Bakhtizin
Bashkir State University, Ufa, Russian Federation
E-mail: latypovkamil@rambler.ru

Heterocyclic polycyclic compounds containing atoms of oxygen and nitrogen are promising materials for molecular electronics. A wide field of application of such compounds requires information on electronic structure, in particular, energy of electron affinity which along with ionizing potentials defines the processes of transport of electrons, bottom and upper boundary of band gap, energy of Fermi quasi-level, and output work. For heterocyclic molecular semiconductors containing atoms of oxygen and nitrogen a connection was found between electron affinity and integral autocorrelation characteristics of the optic spectrum in ultraviolet and visible spectrum based on the concept of absorption spectra as a complex of excited electron states in a strongly correlated electron system. The absorption spectra of molecules were registered in optically-transparent mediums using a spectrophotometer СФ-2000 with interval of 1 nm. We demonstrated that in the series of heterocyclic molecular mediums with growing integral autocorrelation characteristics of the spectrum the electron affinity increases as per quasi-linear law.

The peculiarity of the electronic structure of heterocyclic compounds containing atoms of oxygen and nitrogen are the effects of strong exchange and Coulomb correlation interaction of electrons. These results are proved by data of experiments on registering the optical absorption spectra of heterocyclic molecular semiconductors in the range of 200–600 nm, as well as by quantum-chemical calculations using Hartree–Fock’s methods. The obtained results are substantiated by statistical processing of data using the methods of least-squares and mathematical statistics.

Based on the discovered patterns a method was developed on defining the electron affinity of heterocyclic molecular semiconductors. A method was developed which allows to assess electron affinity as per optical absorption spectra in ultraviolet and visible spectra.

Keywords: electron affinity; integral parameter of autocorrelation function; optical absorption spectra; molecular semiconductors; Hartree–Fock’s method.

References

1. Rambidi N.G., Beryezkin A.V. Fizicheskie i khimicheskie osnovy nanotekhnologii (Physical and chemical basis of nanotechnology). Moscow, Fizmatlit Publ, 2008, 454 p. (in Russ.).
2. Dolomatov M.Yu., Latypov K.F. *Elektromagnitnye volny i elektronnye sistemy*, 2017, Vol. 22, no. 2, pp. 54–60. (in Russ.).
3. Dolomatov M.Yu., Latypov K.F., Dolomatova M.M., Paymurzina N.Kh., Kovaleva E.A. New methods of defining molecular electronic states in nanophotonics and optoelectronics. *International Conference «Nanophotonics and micro/nano optics»*, 07.12.2016–09.12.2016, Paris, France
4. Bol'shakov G.F., Vatago V.S., Agrest F.B. *Ul'tra-fioletovye spektry geteroorganicheskikh soedineniy* (Ultra-violet spectra of heteroorganic compounds). Leningrad, Khimiya Publ., 1969, 504 p. (in Russ.).
5. Jensen F. *Introduction to Computational Chemistry*. England, Southern Gate, Chichester, West Sussex: John Wiley&Sons, Ltd, 2007, 620 p.

Received May 6, 2017

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 ВИНИТИ. Сведения о журнале ежегодно публикуются в международных справочных системах по периодическим и продолжающимся изданиям “Ulrich’s Periodicals Directory”, “Zentralblatt MATH”, “Russian Science Citation Index on Web of Science”.

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.

Редакторы: *О. Шаханская, А. Полякова*

Издательский центр Южно-Уральского государственного университета

Подписано в печать 19.01.2018. Дата выхода в свет 31.01.2018.

Формат 60×84 1/8. Печать цифровая. Усл. печ. л. 8,83.

Тираж 500 экз. Заказ 5/13. Цена свободная.

Отпечатано в типографии Издательского центра ЮУрГУ. 454080, г. Челябинск, проспект Ленина, 76.